

Universidade Federal de São João Del-Rei - UFSJ  
Departamento de Ciências Naturais - DCNAT

Filipe dos Santos Batista

**O aumento da supercondutividade devido a mistura  
antissimétrica de orbitais em sistemas multi-bandas**



**Orientador: Prof. Heron Carlos de Godoy Caldas**

**São João del Rei**

**Mai de 2018**

**Programa de Pós graduação em Física**

**Departamento de Ciências Naturais - DCNAT  
Universidade Federal de São João Del-Rei - UFSJ**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**O aumento da supercondutividade devido a mistura antissimétrica de orbitais em sistemas multi-bandas**

Filipe dos Santos Batista

Orientador: Prof. Heron Carlos de Godoy Caldas

Dissertação de mestrado intitulado "O aumento da supercondutividade devido a mistura antissimétrica de orbitais em sistemas multi-bandas", desenvolvido pelo estudante Filipe dos Santos Batista, sob a orientação do professor Heron Carlos de Godoy Caldas.

Maio de 2018

É preciso não ter medo,  
é preciso ter a coragem de dizer.

Há os que têm vocação para escravo,  
mas há os escravos que se revoltam contra a escravidão.

Não ficar de joelhos,  
que não é racional renunciar a ser livre.  
Mesmo os escravos por vocação  
devem ser obrigados a ser livres,  
quando as algemas forem quebradas.

É preciso não ter medo,  
é preciso ter a coragem de dizer.

O homem deve ser livre.  
O amor é que não se detém ante nenhum obstáculo,  
e pode mesmo existir quando não se é livre.

E no entanto ele é em si mesmo  
a expressão mais elevada do que houver de mais livre  
em todas as gamas do humano sentimento.

É preciso não ter medo,  
é preciso ter a coragem de dizer.

*Carlos Marighella*

***Fora Temer***

# AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente aos meus pais Valdemar Batista e Etiene dos Santos e a minha irmã Letícia Collyer pela amizade e companherismo ao longo da minha trajetória de vida. Dentre o primeiramente está também minha companheira Silvia Vilela que nesse momento carrega pelo último mês em seu corpo o nosso filho Yam Anikulapo.

Carrego com muito carinho todos e todas que passaram pela minha vida durante a academia, mas gostaria de fazer um agradecimento especial a minha amiga Helena (Broto) e meu amigo Augusto (Gutin) que tanto me ensinaram, assim como a Cacá que me acolheu na cidade como se fosse da família, ao meu amigo Matheus (Meifius), esses que estiveram comigo por toda essa caminhada de descobrimentos. Um agradecimento também ao meu amigo Filipe Rodrigues e minha amiga Rafaela Dotta que tanto me ensinaram e estiveram ao meu lado durante meu processo de militância social, assim como meu amigo Marcos Bertachi com seus ensinamentos de educação popular. Um agradecimento aos novos amigos que chegaram e que já são tão especiais, Pedro Inácio, Gabriel (Gabe) e Jailson (Jaca).

Deixar um agradecimento as entidades que fizeram parte do meu caminhar: Movimento dos Trabalhadores Rurais sem Terra, Consulta Popular, DCE UFSJ e ao grande e próspero Levante Popular da Juventude, sem eles não teria descoberto que a Casa Grande pira quando a Senzala vira Mestre, E ao grupo ACESA de Capoeira Angola que esteve todo esse tempo de mestrado comigo.

Um agradecimento ao meu orientador Heron Carlos de Godoy Caldas, pelo convívio nesse tempo de aprendizado e pela oportunidade de ter me apresentado uma área de pesquisa tão linda. Um agradecimento as pessoas que me receberam de braços abertos no CBPF, Professor Múcio Continentino, Professora Fernanda Deus e especialmente ao Griffith que me acompanhou diariamente com os meus problemas numéricos e tantas outras conversas. Sem todos esses essa pesquisa não teria sido possível.

Gostaria de agradecer a todos e todas que de alguma forma contribuíram para o meu aprendizado, os funcionários terceirizados da UFSJ assim como os técnicos, a Lúcia secretária da coordenação da Física (melhor não tem), a todos os professores progressistas do departamento de ciências naturais, aos colegas do grupo Alvimar Celes, Alfredo Vinícius e Wagnô Cesar e um agradecimento especial ao Professor André Mota pelos ensinamentos e aos professores Edson Dias e Pedro Guaranho que além de mestres se tornaram amigos.

Um agradecimento a CAPES pelo suporte financeiro e um desagrado ao (des)governo do (Vice decorativo) Presidente Michel Temer assim como os seus ministros Gilberto Kassab e Mendonça Filho que não representam os anseios do povo Brasileiro. E deixar um repúdio a PEC de congelamento dos gastos públicos.

# Resumo

Descoberta em 1911 por Kamerlingh Onnes, a supercondutividade levou 46 anos para que pudesse ser descrita microscopicamente, quando o trio de pesquisadores formado por Bardeen, Cooper e Schrieffer publicaram seu paper em 1957. Porém, a teoria, hoje chamada teoria BCS, só conseguia descrever supercondutores metálicos com apenas uma banda de condução. Alguns materiais que apresentavam características anômalas não conseguiam ser descritos pela mesma.

Assim, é preciso modificar a teoria e confirmar se ela é capaz de descrever relações mais avançadas que o caso de apenas uma banda de condução, como é o caso de uma liga metálica que pode apresentar mais de uma banda de condução em sua distribuição eletrônica. Faremos uma modificação na Hamiltoniana da teoria BCS, a fim de descrever interações provocadas pela hibridização.

Consideraremos os casos em que essas bandas sejam formadas por orbitais eletrônicos com momento angular, de modo que, a hibridização  $V(\mathbf{k})$  entre eles possam ser simétrica ou anti-simétrica. Levaremos em conta apenas as interações atrativas intra-bandas em duas bandas de condução e o aparecimento de uma indução inter-banda causando um aparecimento de Gaps induzidos. Mostraremos que as interações supercondutoras (inter-bandas) são induzidas na ausência total de interação atrativa entre as duas bandas, o que acaba por ser completamente dependente da hibridização entre elas.

# Abstract

Discovered in 1911 by Kamerlingh Onnes, superconductivity took 46 years to be described with a microscopic approach. It happened in 1957, when the group formed by Bardeen, Cooper and Schrieffer published their article. However, the theory, called BCS Theory, could only describe metallic superconductors with one conduction band. Some materials, which presented anomalous behavior, were not adequately described by the theory.

Thus, it is needed to change the theory and to confirm if it is able to describe more advanced relations than the one which involves only one conduction band. An example of this situation is the case of an alloy, which can present more than one conduction band in its electronic distribution. It will be done a change in the Hamiltonian which describes the BCS Theory, aiming to describe interactions caused by hybridization.

It will be considered the cases that these bands are formed by electronic orbitals with angular momentum, thus, the hybridization between them may be symmetric or anti-symmetric. Only attractive interactions intra-bands in two conduction bands and the emergence of an induced inter-band will be considered, what will result in a pairing of the gaps. It will be shown that superconductors interactions (inter-bands), are induced in the total absence of attractive interactions between two bands, which turns out to be completely dependent on the hybridization between them.

---

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
<b>2</b>	<b>Supercondutividade</b>	<b>10</b>
<b>3</b>	<b>Teoria Microscópica</b>	<b>18</b>
3.1	O Par de Cooper . . . . .	19
3.2	A Teoria BCS . . . . .	22
3.2.1	O Método Variacional . . . . .	25
3.2.2	Energia no Estado Fundamental . . . . .	29
3.2.3	Transformação Canônica . . . . .	31
3.2.4	Estados Excitados . . . . .	34
3.2.5	Temperatura Crítica . . . . .	35
3.2.6	Gap dependente da Temperatura . . . . .	36
<b>4</b>	<b>Supercondutividade em duas Bandas</b>	<b>38</b>
4.1	Supercondutores de Altas Temperaturas . . . . .	39
4.2	Modelo . . . . .	43
4.2.1	Considerações sobre Hibridização e Gap de energia . . . . .	48
4.3	Temperatura Crítica . . . . .	50
4.4	Hibridização Simétrica . . . . .	51
4.5	Hibridização Antissimétrica . . . . .	55
4.6	Cálculo Numérico . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>65</b>
<b>6</b>	<b>Apêndice</b>	<b>67</b>
6.1	A . . . . .	67
6.2	B . . . . .	69
6.3	C . . . . .	70
6.4	D . . . . .	72

## 1 Introdução

Quando nos deparamos com o termo supercondutividade, a primeira impressão pode ser a de que estamos lidando com algo puramente relacionado à física eletromagnética. No entanto, a descoberta dessa propriedade da matéria carrega uma gama de ramificações das áreas da física para seu completo entendimento. A construção de uma teoria que explicasse a supercondutividade teve consigo seus percauços, inclusive na necessidade de espera do amadurecimento de novos paradigmas que dessem base para o desenvolvimento de uma teoria microscópica que explicasse as descobertas experimentais. Detalharemos algumas das importantes contribuições para o desenvolvimento da teoria microscópica da supercondutividade, hoje chamada de teoria BCS da supercondutividade, devido aos seus criadores, e iremos fazer um apanhado introdutório do desenvolvimento para o descobrimento e formulação da mesma.

O momento histórico ao qual estamos inseridos nos dá uma perspectiva privilegiada do desenvolvimento da história da humanidade para suas ramificações científicas. Não tenho pretensões de fazer um estudo historicista sobre o desenvolvimento da ciência, a qual diz respeito a supercondutividade, mas um entendimento do método e de como se deram os avanços na nossa área, e assim, contribuir na formação de novos pesquisadores, e o que simboliza o método científico.

Thomas Kuhn em seu livro, *A Estrutura das Revoluções Científicas*, articula que talvez a ciência não se desenvolva pela acumulação de descobertas, mas sim pelo rompimento dessas descobertas. Para a comunidade científica essas descobertas serão dadas pelos paradigmas, que são os modelos ou mesmo os padrões aceitos pela comunidade científica. Para entender o que Kuhn quer dizer com isso ele define o estudo do aprofundamento de um paradigma como *ciência normal*.

*Para ser aceito como um paradigma, uma teoria deve aparecer melhor que suas competidoras, mas não precisa (e de fato isso nunca acontece) explicar todos os fatos com os quais pode ser confrontada... Quando, pela primeira vez no desenvolvimento de uma ciência da natureza um grupo produz uma síntese capaz de atrair a maioria dos praticantes de ciência da geração seguinte, as escolas mais antigas começam a desaparecer gradualmente. Seu desaparecimento é em parte causado pela conversão de seus adeptos ao novo paradigma [1].*

A ciência normal, então, tem a capacidade de avançar e aperfeiçoar uma teoria já que seus

pares não necessitam de primeiros princípios ou até mesmo conceituações introdutórias articulando, assim, fenômenos e teorias fornecidos pelo paradigma. O final do século XIX e início do XX é um grande campo de estudo epistemológico da ciência, com importantes revoluções científicas é o berço da teoria da supercondutividade. Com alguns conceitos determinados, o segundo capítulo da dissertação tem o objetivo de desmistificar o avanço da ciência como algo neutro e criar uma espécie de linha do tempo da evolução das teorias que deram suporte para teoria microscópica da supercondutividade.

Publicada em 1957 a teoria da supercondutividade foi reconhecida imediatamente como uma obra prima. A teoria BCS conseguia explicar propriedades observadas em supercondutores que só tinham modelos fenomenológicos, rendendo o prêmio Nobel a seus criadores em 1972, sendo considerada como um dos maiores triunfos teóricos do século XX. Com isso, será destinado um capítulo para o entendimento da mesma, articulando novos métodos que facilitam encontrar novos estados das propriedades eletrônicas nos dando um ferramental mais completo para desenvolver o problema proposto.

Com as bases paradigmáticas bem estabelecidas, estudaremos o caso onde existam duas bandas de condução supercondutora, digamos uma banda de condução  $a$  e uma  $b$ , e as relações de hibridizações das mesmas. Teremos duas possibilidades de hibridização, a simétrica e a antisimétrica que dependem do acoplamento em função do momento de onda ( $V(k)$ ). Mostraremos que a interação intra-banda entre os elétrons da banda  $a$  com a banda  $b$  produzirá um Gap induzido de onda  $p$  inter-banda.

## 2 Supercondutividade

O primeiro avanço para a possibilidade da descoberta do estado supercondutor se deu pelos trabalhos de Michael Faraday (1791-1867) e, curiosamente, não pelas suas contribuições em eletromagnetismo, ótica ou eletroquímica; e sim por ser o primeiro Físico a liquefazer o cloro gasoso encontrando uma temperatura de ebulição de  $-34^{\circ}\text{C}$ , temperatura capaz de resfriar algumas amostras abaixo da temperatura ambiente. Apesar de que em 1787 o Físico Martinus van Marum, dos Países Baixos, ter liquefeito amônia, Faraday conseguiu chegar a um método de liquefação permanente a pressão ambiente [2].

Em 1873 o físico-químico Johannes D. van der Waals (1837-1923) contribuiu para a lei geral dos gases com a inclusão do termo de força intermolecular oferecendo uma explicação significativa para o processo de transição de fase. Com essa contribuição, depreende-se que um gás se liquefaria inevitavelmente diante das forças intermoleculares ao atingir a temperatura de transição. Em 1881, Heike Kamerlingh Onnes aluno de grandes nomes como Robert Busen (1811-1899) e Gustav Kirchhoff (1824-1887) começou a montar seu famoso Laboratório intitulado *Door meten tot weten* (cuja tradução livre é "Através da medição ao conhecimento") e teve a oportunidade de conhecer o químico van der Waals já no fim de seu doutoramento, e como experimentalista interessou-se por essa teoria, atribuiu-se, então, o desafio de avaliar o comportamento desses gases a temperaturas baixíssimas, com medições de maior precisão possível.

Já em 1890 com dois métodos de resfriamento avançados, o método de despressurização, e o aperfeiçoamento do método de liquefação em cascata, (que envolve o resfriamento de gases com temperatura de ebulição mais altas para ajudar no processo de resfriamento geral da experiência, passando por 'n' processos para se chegar no resultado final), Onnes chegaria ao hélio líquido, mas antes de conseguir liquefazer o Hélio, Onnes liquefaz em 1906 hidrogênio, alcançando quantidades elevadíssimas de hidrogênio líquido. Em 10 de julho de 1908, o gás de hélio começou a fluir pelo mecanismo de resfriamento e sua temperatura caiu gradativamente até parar em aproximadamente  $4,2\text{K}$ . Na mesma hora Onnes suspeitou que essa temperatura poderia representar a fase de transição, mas não se conseguia observar o líquido até que Onnes ajustou as luzes de forma a observar a interface entre gás e líquido[2]. Nesse momento Onnes escreveu:

*"Foi uma visão maravilhosa quando o líquido, que parecia quase irreal, foi visto pela primeira vez. Sua presença não pôde ser confirmada até que já tivesse enchido o recipiente. Sua superfície estava bem apoiada contra o recipiente como*

a ponta de uma faca"[5].

A resposta de Onnes à ciência, dada após quase cem anos do início dos estudos sobre a liquefação dos gases, pode ser observada em:

*"O problema de Faraday sobre se todos os gases podem ser liquefeitos agora foi resolvido passo a passo no sentido das palavras de van der Waals "a matéria sempre mostrará atração"."*[5].

Onnes manteve-se com o monopólio da produção de hélio líquido no início do século XX, possuindo o único laboratório com capacidade de produção de litros de hélio. Com esse feito, era necessário a resolução de novos problemas. Em 1827 o físico alemão Georg Simon Ohm (1789-1854) publicou seu estudo sobre as propriedades elétricas da matéria. Ele percebeu que se fosse aplicada uma diferença de potencial em uma amostra condutora a temperatura constante, havia um crescimento linear da intensidade de corrente elétrica ( $V \propto I$ ), e esse fator de proporcionalidade era uma característica de resistência do material a passagem de carga elétrica por unidade de tempo, formulando a Lei de Ohm para resistência elétrica ( $V = RI$ ). A relação com a temperatura foi descoberta alguns anos depois por James Prescott Joule (1818-1889) com seus estudos sobre perda de energia em forma de calor na condução de corrente elétrica [3, 4]. A essa altura já havia experimentos que demonstravam uma relação entre temperatura e resistência, o que não se tinha consenso era o que aconteceria nas imediações de zero Kelvin.

Na primeira década do século XX tinham-se três principais teorias para o comportamento da resistência elétrica. Lord Kelvin acreditava que ao se chegar a temperaturas muito baixas os elétrons iriam "congelar" e aumentar rapidamente a resistência. James Dewar (1842-1923) que já havia liquefeito hidrogênio no século XIX, acreditava que a resistência cairia a zero inexoravelmente. Augustus Matthiessen (1831-1870) acreditava que a resistência chegaria ao um limite e se manteria constante, respondendo a alguns resultados experimentais, os quais mostravam que ao se abaixar a temperatura de bons condutores, a resistência se tornaria constante, como demonstrado em amostras de ouro ao limite de um Kelvin.

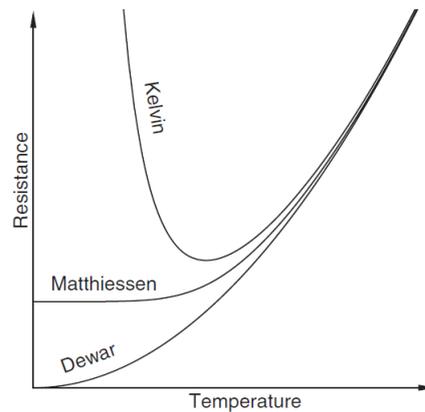


Figura 1: As três principais teorias do comportamento da resistência elétrica em função da temperatura [2]

Os instintos de Onnes estavam reclinados à teoria de Lord Kelvin. A fim de limitar as impurezas do material, evitando assim o espalhamento do elétron em dopagens desconhecidas para uma rede bem definida, Onnes decidiu iniciar seus experimentos com amostras de mercúrio. Em 1911 ele observou que ao hélio atingir temperaturas em torno de  $4.2K$  o medidor de resistência dava um salto para zero. A princípio pensou-se que era um erro de medida, mas ao se elevar a temperatura o medidor voltava a marcar a resistência em seu devido salto. Tinha-se então descoberto a supercondutividade [6].

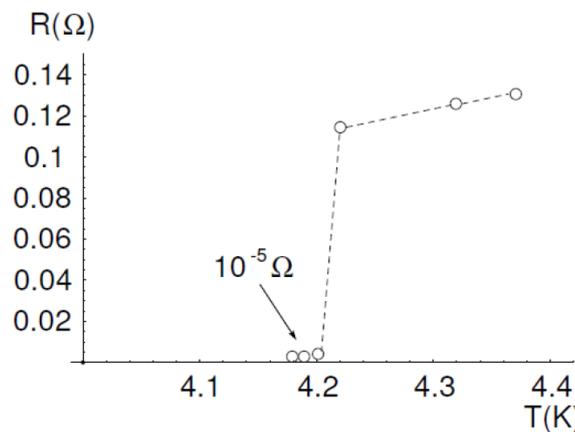


Figura 2: Resistência em função da temperatura para o mercúrio puro [6]

Dando continuidade a seus experimentos, Onnes fez experimentos com mercúrio dopado e observou que a temperatura de transição não se alterava, o que mostrava então que a supercondutividade era intrínseca ao mercúrio. Um ano depois foi descoberta a supercondutividade no estanho e no chumbo com temperatura de transição de  $3,7K$  e  $6K$ , respectivamente,

mostrando que a supercondutividade não era apenas uma propriedade do mercúrio e sim da matéria. Pela liquefação do hélio, o que permitiu a descoberta da supercondutividade, Onnes ganhou o prêmio Nobel de 1913 "fechando" um ciclo de questionamentos sobre duas grandes teorias físicas e abrindo um ciclo infinito de novas possibilidades. Em sua premiação Onnes pontua:

*Quão feliz eu estava de poder mostrar hélio condensado ao meu distinto amigo Van der Waals, cuja teoria me guiou até o fim do meu trabalho sobre a liquefação dos gases."*[5].

Já nos anos de 1930 vários laboratórios tinham acesso as técnicas experimentais para se alcançar os efeitos da supercondutividade e, por isso, o número de elementos supercondutores começou a crescer. Não só o número de elementos, mas também características fundamentais desse novo estado. Observou-se que ao se aplicar certo valor de campo magnético externo, ou se a corrente que passasse pelo supercondutor atingisse um certo valor crítico, o material voltaria ao seu estado normal, fato demonstrado em 1916 por Francis Silsbee. Ainda na década de vinte foram descobertas algumas ligas metálicas com a propriedade de supercondutividade, e o peculiar era que nenhum dos elementos individuais precisavam ser supercondutores. Além disso, apresentavam temperatura crítica e campo magnético externo mais elevados para a mudança de transição, o que era muito interessante, já que pequenos campos magnéticos eram capazes de destruir a supercondutividade [2].

Em 1933, Walther Meissner (1882-1974) e Robert Ochsenfeld (1901-1993) publicaram seus estudos sobre os efeitos de um campo magnético externo aplicado a uma amostra supercondutora perto de sua temperatura crítica. A experiência mostrou-lhes que em vez de o campo magnético externo, constante, passar pela amostra como se passasse pelo vácuo, ele parecia ser expelido, e diferentemente de um condutor perfeito a amostra supercondutora repelia o campo constante criando uma supercorrente. A conclusão publicada pelos dois foi que ao se resfriar a amostra até sua temperatura crítica gera-se um campo magnético contrário dentro da amostra gerado por uma corrente superficial como mostrado na figura abaixo [10].

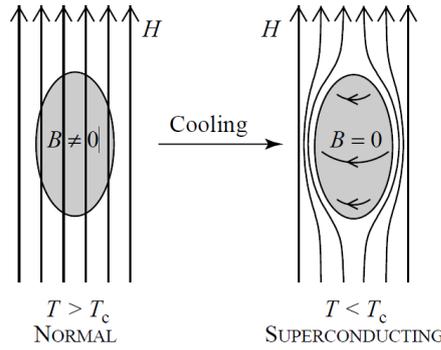


Figura 3: Efeito Meissner em um supercondutor[9]

Tendo um campo magnético igual a zero, pode-se usar em materiais magnetizados a lei de Ampère, que relaciona o campo magnético externo e a magnetização do material

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H}_{ext} + \mathbf{M}) \quad (1)$$

para o estado supercondutor ( $\mathbf{B} = 0$ ), o campo magnético induzido é igual ao campo magnético externo com sentido oposto ( $\mathbf{M} = -\mathbf{H}_{ext}$ ). Esse resultado nos mostra que um supercondutor supera as expectativas de ser um condutor perfeito e passa a ser reconhecido como um diamagneto. O mais impressionante dessa observação é quando se trata da suscetibilidade magnética ( $\chi = \frac{d\mathbf{M}}{d\mathbf{H}}$ ), que é a capacidade de um material se magnetizar. Encontram-se na literatura materiais diamagnéticos com suscetibilidade que variam de  $-10^{-9}$  como é o caso do hidrogênio até  $-10^{-4}$  para o bismuto [11]. Já no caso de materiais supercondutores, tem-se  $\chi = -1$  que nos confirma a propriedade de um *diamagneto perfeito* responsável pela levitação magnética.

Ao olhar a Figura 3, observa-se que a diferença entre o estado normal e o estado supercondutor é dada por dois parâmetros independentes: temperatura ( $T$ ) e campo magnético ( $\mathbf{H}$ ). Um intensivo e outro extensivo. Sendo assim, o que define se a amostra se encontra no estado normal ou no estado supercondutor são os parâmetros da energia livre de Helmholtz de um estado termodinâmico. Ao contrário do que se pensava, a supercondutividade não é caracterizada por um estado de resistência nula, e sim por um estado termodinâmico de temperatura e de campo magnético.

Em 1934 Cornelis Jacobus Gorter (1907-1980) e Hendrik Brugt Gerhard Casimir (1909-2000) publicaram seu estudo sobre o tratamento fenomenológico com base nas leis da termodinâmica para o efeito Meissner [12]. Trata-se de um campo magnético aplicado em um supercondutor metálico, que carrega a simetria de não distorção do campo magnético externo.

Dessa forma tem-se a densidade de energia para os parâmetros de temperatura e campo magnético, dadas pela primeira lei da termodinâmica

$$d\mathcal{E} = TdS + \frac{1}{4\pi}\mathbf{H} \cdot d\mathbf{B} \quad (2)$$

Determinadas as energias livres de Helmholtz e Gibbs para os parâmetros independentes, tem-se que o campo magnético crítico é dependente da temperatura, e fator determinante para a perda da supercondutividade, como mostrado na figura abaixo.

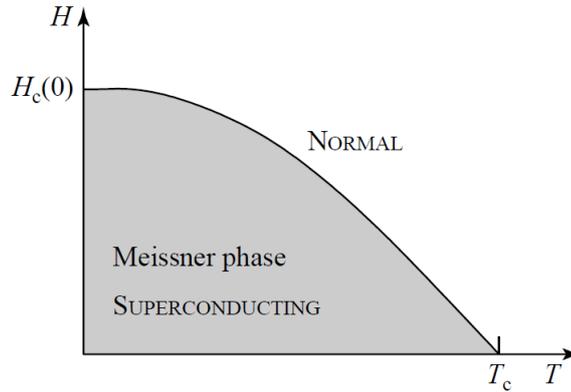


Figura 4: Fase de Meissner para um supercondutor[9]

Outro fato importante, é que a energia no estado normal é maior que no estado supercondutor, por uma diferença de

$$\mathcal{F}_n(T) - \mathcal{F}_s(T) = \frac{\mu_0 H_c^2}{8\pi}, \quad (3)$$

dessa forma, ao se passar de fase a energia é minimizada. A Figura 4 também mostra que o decaimento do campo crítico em relação a temperatura pode ser aproximado por um decaimento parabólico na forma

$$H_c(T) = H_c(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 \quad (4)$$

A década de vinte trouxe inúmeras revoluções nos paradigmas da física, com isso, algumas melhorias em teorias que tinham seu fundamento clássico foram aperfeiçoadas. Paul Drude (1863-1906) foi responsável por fazer um melhoramento clássico da Lei de Ohm integrando seus fundamentos à teoria magnética de Maxwell. Seu modelo era pensado para um gás de elétrons que se moviam em direção ao maior potencial e se chocavam com os íons da rede. Com isso, a integração da mecânica quântica a essa teoria viria por meio dos estudos de Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868-1951), que usou os resultados de Enrico Fermi e Paul Dirac para descrever a propriedade estatística dos elétrons, aplicando-a nos estudos de

Drude. Esse resultado explicava bem os condutores, mas não se aplicava aos supercondutores. Como ponto de partida, lançamos mão da teoria clássica, segunda lei de Newton, atrelando-a aos resultados dos estudos acima para que se possa compreender o fenômeno da supercondutividade.

$$q\mathbf{E} - \gamma \langle \mathbf{v} \rangle = m \frac{d}{dt} \langle \mathbf{v} \rangle \quad (5)$$

Tem-se, então, a força elétrica menos a força de resistência ( $\gamma[kg/s]$ ,  $\mathbf{v}[m/s]$ ) igual a sua massa vezes a aceleração. Assumiremos um estado estacionário ( $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{v} \rangle = 0$ ). O tempo médio de um portador de cargas como  $\tau = m/\gamma[s]$  precisa ser definido, e a mobilidade elétrica, que é a capacidade de partículas carregadas se movimentarem através de um potencial definido por ( $\mu = v_d/|\mathbf{E}|$ ), que nos dá unidade de carga tempo por massa ( $C.s/kg$ ). Substituindo essas transformações na equação (5) tem-se que

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{q\mathbf{E}}{\gamma} = \mu\mathbf{E} \quad (6)$$

Pode-se introduzir a densidade de corrente ( $\mathbf{j} = nq\mathbf{v}$ ), na qual  $n$  é a densidade de portadores de carga por unidade de volume, e derivar a densidade de corrente com relação ao tempo temos

$$\frac{d}{dt} \mathbf{j} = \frac{nq^2}{m} \mathbf{E}. \quad (7)$$

Até o momento, o maior fundamento da supercondutividade era dado pelo efeito Meissner. O próximo salto se deu em 1935 por dois irmãos alemães Fritz London (1900-1954) e Heinz London (1907-1970) [13]. No início da década de trinta, o fascismo na Alemanha tomou forma, a perseguição aos judeus se intensificou, obrigando os irmãos London a fugirem de seu país natal. Como refugiados, os irmãos ingressaram com sua pesquisa na Universidade de Oxford. Eles sabiam que a lei de Ohm ou o modelo de Drude-Sommerfeld não respondiam à supercondutividade, pois existia uma corrente superficial sem a aplicação de uma diferença de potencial, como previsto no efeito Meissner. Derivaremos, portanto, a quarta equação de Maxwell (Lei de Ampere) em unidades Gaussiana em função do tempo

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} \quad (8)$$

Substituindo a equação (7) em (8) e passando o rotacional nos dois lados tem-se

$$\nabla \times \left( \nabla \times \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \right) = \left( \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{4\pi nq^2}{mc} \right) \nabla \times \mathbf{E} \quad (9)$$

A terceira equação de Maxwell (lei de indução de Faraday) nos diz que  $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$

e tomando  $\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi nq^2}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) + \left( \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{\lambda^2} \right) \mathbf{H} \right] = 0 \quad (10)$$

A equação acima é obtida levando em consideração um condutor perfeito ( $\rho = 0$ ), para que ela tenha validade na supercondutividade. A partir do modelo de Meissner percebe-se que deve-se excluir a dependência temporal do campo obtendo o termo entre colchetes nulo. Assim a segunda equação de London se torna

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) + \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{H} = 0. \quad (11)$$

Ao reescrever a equação acima, substituindo o primeiro termo pela propriedade do rotacional  $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) = \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H}$ , emprega-se a lei de Gauss para o magnetismo ( $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ ), simplificando a equação na forma

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{H} \quad (12)$$

Suponha-se que há uma penetração do campo magnético na direção  $x$  a fim de simplificar o problema na forma unidimensional para o Laplaciano. Ao usar a condição de contorno  $\mathbf{H}(0) = h$ , sendo  $\mathbf{h} = \mathbf{B}/\mu_0$  o campo aplicado no vácuo, a equação acima se torna

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathbf{H} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{H} \longrightarrow \mathbf{H} = \mathbf{h}_f e^{\frac{-x}{\lambda}} \quad (13)$$

Com essa expressão pode-se observar que assim que o campo magnético penetra na amostra supercondutora, ele decai de forma exponencial e o fator  $\lambda$  mede o comprimento de penetração do campo na amostra supercondutora. O que é chamado de **profundidade de penetração de London**. Esse e outros estudos, que não serão apresentados aqui, foram de suma importância para os resultados da teoria microscópica da supercondutividade.

### 3 Teoria Microscópica da Supercondutividade

No início da segunda metade do século XX, algumas respostas sobre a supercondutividade ainda deveriam ser respondidas. A última peça do quebra cabeça tinha sido a teoria dos irmãos London, e até o momento a supercondutividade estava focada no comportamento dos elétrons, da corrente e do campo magnético. Os avanços da mecânica quântica e da teoria quântica de campos já davam suportes maiores aos pesquisadores que conseguiam descrever o comportamento microscópico da matéria de forma a obter teorias mais elegantes dada as observações experimentais. O físico Hebert Fröhlich (1905-1991) queria entender o fenomeno das vibrações da rede cristalina, e até o momento sabia-se, por exemplo, que para um sistema que se comporta como um oscilador harmônico ligando massas com efeitos de primeiro vizinhos, a frequência de vibração de uma rede é proporcional ao inverso da raiz quadrada da massa ( $f \propto 1/M^{1/2}$ ), e essa frequência de vibração controla o quanta de energia do sistema.

Ao realizar experimentos com isótopos supercondutores [15], que não perdem sua característica eletrônica e cristalina, descobriu-se em 1950, que a temperatura de transição era inversamente proporcional a raiz quadrada da massa. Ou seja, isótopos de maior massa tinham temperaturas de transição menores [7, 16]. Já em 1951, no mesmo laboratório em que Emanuel Maxwell descobriu o efeito isotopo, conseguiu-se determinar as temperaturas de transição para amostras de mercúrio como mostrado na tabela 1, sendo a massa mais estável do mercúrio igual a amostra de número 3.

Tabela 1: Temperatura crítica em função da média da massa[19]

Amostra	$M$	$T_c$ K
1	199,5	4,185
2	199,7	4,184
<b>3</b>	<b>200,7</b>	<b>4,173</b>
4	202,0	4,159
5	202,2	4,160
6	203,2	4,146
7	203,4	4,146

John Bardeen (1908-1991), que já havia ganho um premio nobel em 1956 por pesquisas de semicondutores e a descoberta do transistor, e Fröhlich, debruçaram-se nesse comportamento do efeito isotopo, porém, o fizeram para partículas não interagentes, sem repulsão Coulombi-

ana. Ao se propor um modelo com tal interação, não se verificava correspondência aos resultados experimentais. Fröhlich e Bardeen [17, 18] atacaram o problema abordando uma interação elétron-fonon de forma a anular a força columbiana entre os elétrons que estavam acima do mar de Fermi. Ao passar pela rede cristalina, o primeiro elétron polariza o meio, atraindo os íons positivos. Por sua vez, os íons positivos atraem um segundo elétron, proporcionando uma interação atrativa eficaz entre os dois elétrons. Se essa interação for forte o suficiente para blindar a repulsão da força de Coulomb, ela dará origem a uma interação atrativa líquida e resultará na supercondutividade. Com isso, ao pegar um isótopo de maior massa média, a rede cristalina terá mais dificuldades de se moldar à passagem do elétron (efeito elétron-fónon), fazendo com que seja necessário uma energia térmica menor para transição de fase do sistema, como pode-se observar na tabela 1 [19].

### 3.1 O Par de Cooper

O início da década de cinquenta trouxe elementos significativos para o desenvolvimento de uma teoria microscópica da supercondutividade. Fröhlich com suas análises do efeito isótopo tentou descrever o comportamento dos elétrons como um sistema degenerado de gás de fermi com interações atrativas, aplicando o método perturbativo. Porém, não alcançou êxito com esse modelo. Bardeen estava ciente de que deveria descrever um modelo com base na teoria de campos e foi aconselhado a convidar o jovem pesquisador Leon Neil Cooper, que estava terminando seu pós-doutorado em Princeton, para desenvolver um trabalho em conjunto. Cooper foi capaz de mostrar que independentemente de quão fraca é uma ligação entre dois elétrons, o mar de Fermi se torna instável para a formação de pelo menos um par de elétrons ligados, o que pode ser explicado pela estatística de Fermi [24].

Para entender como essa ligação se dá, foi proposto um modelo simples que representa a movimentação de dois elétrons não interagentes com o mar de Fermi à temperatura de zero Kelvin. Necessita-se achar uma função de onda que represente a movimentação desses dois elétrons, tendo em vista pelos argumentos de Bloch que a menor energia é quando tem-se o momento total igual a zero, de forma que eles tenham momentos de módulo e direção iguais e sentidos opostos. Outro argumento importante para a soma dos momentos ser igual a zero é que, caso o contrário, teria-se um momento não nulo gerando uma corrente elétrica sem a presença de um campo elétrico. Construiu-se, então, uma função de onda orbital do tipo

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2} = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (14)$$

Ao usar a fórmula de Euler ( $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$ ) podemos reescrever a equação na forma

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} [\cos \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + i \sin \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] \quad (15)$$

Onde  $g_{\mathbf{k}}$  é a amplitude de probabilidade de se encontrar um par de elétrons com momento  $\hbar\mathbf{k}$  e outro  $-\hbar\mathbf{k}$  e  $g_{\mathbf{k}} = 0$  para  $|\mathbf{k}| < k_f = \sqrt{2mE_f}$ . Precisa-se incluir nessa equação de onda a relação de spin para cada elétron, levando em conta a antissimetria total da função de onda ( $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ ), não podendo perder essa característica. Podemos então ter duas equações distintas, a primeira para a função antisimétrica do spin singleto e outra contendo a função do spin tripleto

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[ \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}} \cos \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \quad (16)$$

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[ \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}} i \sin \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] (\alpha_1 \alpha_2, \alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2, \beta_1 \beta_2) \quad (17)$$

A antissimetria deve ser conservada para a função de onda total. Com  $\alpha_1$  igual a spin "up" e  $\beta_1$  spin "down" da partícula um e  $\alpha_2$  igual a spin "up" e  $\beta_2$  spin "down" da partícula dois. A função singleto manterá a antissimetria cosenoidal e terá uma amplitude de probabilidade maior de manter os elétrons perto. Então consideraremos apenas a função singleto para dois elétrons. Outro fator importante é que a função Singleto responde a um spin total igual a zero ( $S = 0$ ) e a Tripleto a um spin total igual a um ( $S = 1$ ). Ao se inserir a equação de onda na solução de Schrödinger ( $\mathbf{H}\psi_0 = E\psi_0$ ) não perturbada tem-se

$$\left[ \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2_{1f}}{2m} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2_{2f}}{2m} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (18)$$

Faremos a substituição da função de onda no formato exponencial, mantendo a simetria exigida com  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$

$$\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} [E - 2\epsilon_{\mathbf{k}}] g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} V(\mathbf{r}) g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (19)$$

No qual  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  é a energia cinética (energia de dispersão) do elétron com momento  $\mathbf{k}$ . Podemos integrar os dois lados pela integral  $\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$  (transformada de Fourier)

$$\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} [E - 2\epsilon_{\mathbf{k}}] g_{\mathbf{k}} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} = \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \quad (20)$$

A interação entre os dois elétrons é dada na superfície de Fermi, logo, o espalhamento sofrido pelo elétron de momento  $\mathbf{k}$  para  $\mathbf{k}'$  é basicamente elástico, assim podemos ver que o lado esquerdo da equação (20) é a representação do delta de Dirac na forma exponencial e o lado direito da equação é uma transformada de Fourier da forma

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \Omega^{-1} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (21)$$

Podemos reescrever a equação (20) na forma

$$[E - 2\epsilon_{\mathbf{k}'}] g_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (22)$$

Cooper percebeu que seria muito difícil analisar todas as possibilidades de  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  então ele apresentou uma aproximação muito útil onde  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V$

$$[E - 2\epsilon_{\mathbf{k}'}] g_{\mathbf{k}'} = -V \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}} \quad (23)$$

Somaremos ambos os lados por  $\sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_f}$

$$\sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_f} \frac{V}{2\epsilon_{\mathbf{k}'} - E} \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_f} g_{\mathbf{k}} \quad (24)$$

Pelas condições de espalhamento do sistema  $g_{\mathbf{k}'} = g_{\mathbf{k}}$ , logo o potencial de interação do sistema é dado por

$$\frac{1}{V} = \sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_f} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}'} - E} \quad (25)$$

A substituição do somatório por uma integral pode ser realizada da seguinte forma

$$\sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_f} \longrightarrow \frac{Vol}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \quad (26)$$

$$\frac{1}{V} = \frac{Vol}{(2\pi)^3} \int 4\pi k^2 dk \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}'} - E} \quad (27)$$

A energia de dispersão é da forma parabólica ( $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m}$ ), ou seja, uma função quadrática par. Podemos fazer uma rotação no eixo ao substituir a integração de momento pela energia de dispersão

$$\frac{1}{V} = \frac{Vol\sqrt{2m\epsilon m}}{2\pi^2} \int_{E_f}^{E_f+\hbar\omega_D} d\epsilon_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}} - E} \quad (28)$$

chamaremos  $\frac{Volk_fm}{2\pi^2}$  de densidade de estado no nível de Fermi ( $N(0)$ )

$$\frac{1}{VN(0)} = \int_{E_f}^{E_f+\hbar\omega_D} d\epsilon_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}} - E} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{2E_f + 2\hbar\omega_D - E}{2E_f - E} \right) \quad (29)$$

Ao aplicar a exponencial em ambos os lados e simplificar e equação chegaremos a expressão

$$E = 2E_f - \frac{2\hbar\omega_D}{\left(e^{\frac{2}{VN(0)}} - 1\right)} \quad (30)$$

Segundo a bibliografia, a maioria dos supercondutores clássicos possuem  $VN(0) < 0,3$ , o que nos permite usar a aproximação de acoplamento fraco e reescrever a equação como

$$E - 2E_f = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{VN(0)}} \quad (31)$$

Para um conjunto de  $g_{\mathbf{k}}$  que satisfaça  $2E_f > E$  teremos um estado ligado composto por elétrons com momento  $\mathbf{k} > \mathbf{k}_f$  acima da energia de Fermi, independente de quão pequeno pode ser o acoplamento. Outra característica importante desse resultado é que essa diferença de energia sugere um Gap de energia na supercondutividade, o que foi encontrado experimentalmente por Rolfe Glover e Michael Tinkham, em 1956, ao exporem uma amostra supercondutora a radiação infravermelho, observaram que a energia era absorvida pela amostra a partir de um certo valor quantizado (quebra de um par de Cooper), entretanto, para valores inferiores nada acontecia.

### 3.2 A Teoria BCS

Cooper deu um grande avanço para teoria microscópica da supercondutividade, mas ainda havia alguns caminhos a percorrerem. Como tinha-se um modelo para dois elétrons livres, o primeiro passo seria generalizar uma função de onda ( $\Psi_N$ ) para " $N$ "elétrons

$$\Psi_N = \psi(1, 2)\psi(3, 4)\psi(5, 6)\dots\psi(N-1, N). \quad (32)$$

A função de onda para o par de Cooper é definida como  $\psi(n-1, n) = \phi(\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_n)\chi(\sigma_{n-1}, \sigma_n)$ , no qual  $\phi$  é a função de onda independente do tempo e  $\chi$  é a função antisimétrica dos Spins, e

para garantir o princípio de exclusão de Pauli e a antissimetria da função, ela deve ser multiplicada por um operador  $\hat{A}$ . Esse operador aumenta rapidamente conforme o número de pares aumenta como determina o manuseio de tal propriedade fermiônica, dada pelo determinante de Slater, que é a especificação da antissimetria da função de onda expressa por uma matriz  $N \times N$ . A função de onda proposta por Cooper (14) aplicada em (32) se torna

$$\Psi_N = \sum_{\mathbf{k}_{1,2}} \dots \sum_{\mathbf{k}_{N/2}} g_{\mathbf{k}_{1,2}} \dots g_{\mathbf{k}_{N/2}} \hat{A} (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \dots e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N)}) \times [\chi(\sigma_1, \sigma_2) \dots \chi(\sigma_{N-1}, \sigma_N)] \quad (33)$$

É impossível tirar informações coerentes dessa generalização da função de onda de Cooper. Bardeen, Cooper e Schrieffer tentaram esse modelo para um número limitado de elétrons, porém ao fixarem o número de elétrons não obtiveram o sucesso esperado. Outro problema era que um estado ligado sofria interferência de outros elétrons. Poderia existir uma infinidade de elétrons entre esse par, que está a uma distância equivalente ao comprimento de coerência de Pippard. Sabe-se que manusear uma álgebra para uma função antisimétrica é mais palpável usando as técnicas de segunda quantização, e foi assim que Schrieffer estava propondo sua função de onda para a supercondutividade. Em vez de se ter vários pares de Cooper, Schrieffer pensou em uma função de onda onde todos os elétrons estivessem juntos como se cada elétron se comportasse como parte de um todo maior inseparável. Assim, a função de onda era da forma

$$|\psi_0\rangle = \sum_{k > k_f} g_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* |F\rangle \quad (34)$$

na qual  $c_{\mathbf{k}\uparrow}^*$  é o operador criação responsável pela criação de um elétron de momento  $\mathbf{k}$  e spin up ( $\uparrow$ ) e  $c_{-\mathbf{k}\downarrow}^*$  pela criação de um elétron de momento  $-\mathbf{k}$  spin down ( $\downarrow$ ). O autoestado  $|F\rangle$  representa a superfície de Fermi preenchida até  $k_f$ . De acordo com emparelhamento de Cooper para seus momentos de Spin em função do estado de vácuo ( $|\phi_0\rangle$ ), a generalização da função para " $N$ " elétrons se dá por

$$|\psi_N\rangle = \sum_{k_i > k_f} \dots \sum_{k_l > k_f} g(\mathbf{k}_i, \dots, \mathbf{k}_l) c_{\mathbf{k}_i\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}_i\downarrow}^* \dots c_{\mathbf{k}_l\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}_l\downarrow}^* |\phi_0\rangle \quad (35)$$

O manuseio dessa expressão ainda era inviável, com uma possibilidade para uma aproximação pelo método Hartree auto-consistente. Porém, essa função deveria ser capaz de explicar todas as observações fenomenológicas da supercondutividade, de quase cinquenta anos. Schrieffer já sabia como ele queria essa função de onda e alguns truques eram muito conhecidos nos

problemas de mecânica quântica. A primeira afirmação era que o número total de partículas não era fixo. Para explicar tal comportamento, já que para um metal há um número finito de elétrons, ele supôs que, no estado supercondutor, o metal estaria ligado a um reservatório de elétrons. Outro truque foi incluir uma série de parâmetros desconhecidos, com um certo grau de liberdade, para se obter um melhor ajuste conforme a realidade e minimizar a energia com respeito a esses parâmetros, já que a natureza sempre encontra solução para a menor energia do sistema [25]. Seguindo sua intuição, Schrieffer propôs uma função de onda, hoje conhecida como função de onda do *estado fundamental da teoria BCS*, como

$$|\psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_M} (u_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^*) |\phi_0\rangle \quad (36)$$

Os parâmetros incluídos implicaram na amplitude de probabilidade de se criar ou não um par de elétrons de momento e spin  $\mathbf{k} \uparrow$  e  $-\mathbf{k} \downarrow$ . Ou seja, a probabilidade de criação de um par de elétrons ligados é  $|\nu_{\mathbf{k}}|^2$  e a probabilidade de não criação é  $1 - |\nu_{\mathbf{k}}|^2 = u_{\mathbf{k}}^2$ . Os parâmetros  $u_{\mathbf{k}}$  e  $\nu_{\mathbf{k}}$  mantiveram a relação  $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 = 1$  e serão tomados como reais, respeitando uma diferença dada pelo fator de fase  $e^{i\varphi}$  e  $\varphi$ , não depende do momento  $\mathbf{k}$ , o que é relevante para o entendimento do condensado macroscópico da função de onda. A função no estado fundamental pode ser reescrita aplicando o operador  $\sum_N |\psi_N\rangle \langle \psi_N| = 1$

$$|\psi_G\rangle = \sum_N |\psi_N\rangle \langle \psi_N | \psi_G\rangle = \sum_N \lambda_N |\psi_N\rangle \quad (37)$$

O termo  $\lambda_N$  é a amplitude de probabilidade do estado  $|\psi_G\rangle$  colapsar em  $|\psi_N\rangle$ , e cada termo representa a expansão do produto representado na equação (36) contendo  $N/2$  pares ligados. Entretanto, encontrar os valores esperados de  $|\lambda_N|^2$  é inviável ao utilizar esse método. Calcularemos o valor esperado de pares ligados aplicando operador número ( $n_{\mathbf{k}\sigma}$ ), definido como  $c_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma}$ , entre os estados fundamentais para as duas possibilidades de spin

$$\bar{N} = \langle \psi_G | \left( \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^* c_{\mathbf{k}\downarrow} \right) | \psi_G \rangle \quad (38)$$

O estado fundamental da teoria BCS prevê a existência de elétrons que respeitam os pares de spin antiparalelos. Num estado supercondutor com  $N/2$  pares existem  $N/2$  elétrons com spin up e  $N/2$  elétrons com spin down, portanto esses números são iguais, assim o valor médio do número de partículas com spin para cima e spin para baixo na forma  $\langle \psi_G | c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} | \psi_G \rangle = \langle \psi_G | c_{\mathbf{k}\downarrow}^* c_{\mathbf{k}\downarrow} | \psi_G \rangle$ , nos dando

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_G | c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} | \psi_G \rangle. \quad (39)$$

O resultado a seguir é demonstrado no Apêndice A

$$\bar{N} = \sum_{\mathbf{k}} 2|\nu_{\mathbf{k}}|^2. \quad (40)$$

Ao calcular o valor esperado de  $\langle \bar{N}^2 \rangle$  tem-se o desvio padrão do número de contribuidores para os estados ligados de elétrons.

$$\langle (N - \bar{N})^2 \rangle = 4 \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 \nu_{\mathbf{k}}^2 \quad (41)$$

### 3.2.1 O Método Variacional

Ao olharmos o estado  $|\psi_N\rangle$  podemos pensar que, pelo fato de todos os pares serem descritos com a mesma energia, poderíamos diminuir a energia do sistema permitindo que mais pares de Cooper sejam formados. Respeitando a simetria dos momentos e dos spins opostos, a partir do estado fundamental de Fermi-Dirac, devemos tomar dois elétrons com energia inferior à energia de Fermi e ligá-los com energia superior de modo a ganhar energia potencial atrativa. Se esse processo acontecesse indefinidamente teríamos todos os elétrons do sistema acima da energia de Fermi ligados, o que não é real. Sabemos pela formulação de Cooper que para um estado ligado precisamos de um estado  $|\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow\rangle$  desocupado. Conforme os pares vão se ligando, a probabilidade de um estado estar desocupado diminui a um ponto que deva se estabilizar a função de onda a uma energia mínima. A função de onda  $|\psi_G\rangle$  responde a características interessantes como o princípio de incerteza da quantidade de partículas em relação ao estado macroscópico. Agora, precisa-se determinar os valores de  $\nu_{\mathbf{k}}$  e  $u_{\mathbf{k}}$  pelo método variacional. A Hamiltoniana do emparelhamento é dada por

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} \quad (42)$$

A Hamiltoniana acima possui todos os termos necessários para se estudar a supercondutividade, mesmo omitindo termos que são importantes para outros estudos, como elétrons desemparelhados com momento  $\mathbf{k}$  menor que  $\mathbf{k}_f$ , definida como uma função de onda nula para condições da teoria BCS. Para regular a média do número de partículas inclui-se o termo de potencial químico ( $\mu$ ) relacionado ao operador número de partícula ( $n_{\mathbf{k}\sigma} = c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}$ )

$$\delta \langle \psi_G | \mathcal{H} - \mu n_{\mathbf{k}\sigma} | \psi_G \rangle = 0 \quad (43)$$

A parte sem interação terá uma nova relação dada por  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ , na qual o potencial químico é dado pela energia de Fermi do sistema. Assim, reescreve-se o valor esperado da energia para o estado fundamental na forma

$$\delta \left[ \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_G | \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} | \psi_G \rangle + \langle \psi_G | \sum_{\mathbf{kl}} V_{\mathbf{kl}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} | \psi_G \rangle \right] = 0 \quad (44)$$

Sendo  $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$  a energia relativa de uma única partícula menos o potencial químico, e os valores esperados dos operadores de criação e destruição para o termo sem interação e com interação calculados no apêndice A, o valor esperado da energia torna-se

$$\langle \mathcal{H} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} |\nu_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{kl}} V_{\mathbf{kl}} u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{l}}^* \nu_{\mathbf{l}} \quad (45)$$

O termo de interação mostrado na equação acima pode ser entendido como o potencial de espalhamento do estado ( $l \uparrow, -l \downarrow$ ) para um novo estado ( $k \uparrow, -k \downarrow$ ). Com isso, precisa-se ter inicialmente estados ocupados com momento  $l$  e com estados vazios  $k$ . Respeitando as condições propostas para a função de onda no estado fundamental, substitui-se  $\nu_{\mathbf{k}}$  e  $u_{\mathbf{k}}$  por  $\cos(\theta_{\mathbf{k}})$  e  $\sin(\theta_{\mathbf{k}})$  respectivamente, uma vez que essas funções respeitam  $\nu_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}}^2 = 1$ . No entanto, ao invés de encontrarmos  $\nu_{\mathbf{k}}$  ou  $u_{\mathbf{k}}$ , resta agora encontrar  $\theta_{\mathbf{k}}$ .

$$\langle \psi_G | \mathcal{H} | \psi_G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \cos^2(\theta_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{kl}} V_{\mathbf{kl}} \sin(\theta_{\mathbf{k}}) \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \sin(\theta_{\mathbf{l}}) \cos(\theta_{\mathbf{l}}) \quad (46)$$

Para facilitar o processo de minimização da hamiltonina deve-se fazer algumas substituições trigonométricas obtendo a equação

$$\langle \psi_G | \mathcal{H} | \psi_G \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} [1 + \cos(2\theta_{\mathbf{k}})] + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{kl}} V_{\mathbf{kl}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) \sin(2\theta_{\mathbf{l}}) \quad (47)$$

Ao minimizar-se equação acima em relação a um determinado  $\theta_{\mathbf{k}}$  e para achar o mínimo tem-se que  $\frac{\partial}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} \langle \mathcal{H} \rangle = 0$ . Note que no termo de acoplamento tem-se um somatório em dois índices, logo existe dois fatores idênticos para mesma derivada que é

$$-2\xi_{\mathbf{k}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) \sin(2\theta_{\mathbf{l}}) = 0 \quad (48)$$

Ao se isolar os termos dependentes apenas de "k" de um lado e de "l" do outro na equação acima, tem-se

$$2\xi_{\mathbf{k}} \tan(2\theta_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \sin(2\theta_{\mathbf{l}}) \quad (49)$$

Pode-se observar que o somatório em "l" na parte direita da equação converge a um determinado valor dependente de "k". Esse somatório será chamado de  $-\Delta_{\mathbf{k}}$  e será definido como parâmetro de ordem

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} u_{\mathbf{l}} \nu_{\mathbf{l}} = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \sin(\theta_{\mathbf{l}}) \cos(\theta_{\mathbf{l}}) = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \frac{1}{2} \sin(2\theta_{\mathbf{l}}) \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \langle c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} \rangle = -\xi_{\mathbf{k}} \tan(2\theta_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (50)$$

Observa-se que o novo parâmetro de ordem tem dimensão de energia, com isso, define-se um novo parâmetro, dado por  $E_{\mathbf{k}}$  que será a energia de quasi-partícula e, como  $\Delta_{\mathbf{k}}$  é um parâmetro independente do momento l, tem-se uma mínima energia possível para o estado supercondutor

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2} \quad (51)$$

Ao ajustar-se a equação (49) com o devido parâmetro da equação (50) deve-se multiplicar em cima e embaixo o termo de quasi-partícula, obtendo

$$\tan(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}/E_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}/E_{\mathbf{k}}} \quad (52)$$

Daqui tira-se as relações trigonométricas

$$\begin{aligned} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} = 2u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} \\ \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) &= -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} = \nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 \end{aligned} \quad (53)$$

Em relação à equação (49), pode-se reescrevê-la usando a definição da equação (50)

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \sin(2\theta_{\mathbf{l}}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{E_{\mathbf{l}}} \quad (54)$$

A solução trivial para essa equação é dada para  $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$ , o que não nos interessa neste momento, já que se procura o mais baixo nível de energia do parâmetro de ordem. Dessa forma, deve-se usar a mesma consideração feita por Cooper para o potencial de ligação de um par

$$V_{\mathbf{k}} = \begin{cases} -V & |\xi_{\mathbf{k},1}| \leq \hbar\omega_c \\ 0 & |\xi_{\mathbf{k},1}| > \hbar\omega_c \end{cases} \quad (55)$$

Sendo  $V$  uma constante positiva, a necessidade teórica sobre  $V_{\mathbf{k}1}$  sugere que a energia relevante entre  $|\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{l}}|$  seja a energia produzida pelo espalhamento. Precisa-se, então, ter a restrição de que essa diferença de energia seja menor que  $\hbar\omega_c$ , como demonstrado anteriormente, para que não mude o módulo do momento do par de elétrons.

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta & |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_c \\ 0 & |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_c \end{cases} \quad (56)$$

Consegue-se, assim, cortar os dois  $\Delta$  na equação (54) obtendo

$$\frac{2}{V} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}} \quad (57)$$

Para um volume finito, existe um número discreto de modos que satisfaçam as condições de contorno impostas. Como este volume se aproxima de tamanho infinito, o somatório sobre  $\mathbf{k}$  será a aproximação de uma integral. Para executar um processo limitante, deve-se usar a seguintes relações.

$$\sum_{\mathbf{k}} \mapsto \int \rho(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (58)$$

sendo  $\rho(\mathbf{k}) \frac{V_{ol}}{(2\pi)^3}$  a densidade de estados no espaço  $\mathbf{k}$ , e a energia de dispersão com simetria parabólica dada por  $\xi_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m} - \mu$ , tem-se  $k = \sqrt{2m(\xi_{\mathbf{k}} + \mu)}$

$$\frac{2}{V} = \int d\Omega_{\mathbf{k}} \int \rho(\mathbf{k}) dk \frac{1}{(\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}} \quad (59)$$

A integral em  $\Omega_{\mathbf{k}}$  é bem conhecida em uma mudança de variável de simetria esférica dada por  $4\pi$ . Ao fazer-se uma rotação no eixo dos momentos, pode-se integrar na variável de energia que possui um intervalo de integração conhecido, de  $-\hbar\omega_D$  até  $\hbar\omega_D$ , uma função par, obtém-se a integral de zero a  $\hbar\omega_D$  multiplicando-a por dois, assim

$$\frac{1}{V} = \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_{\mathbf{k}} \frac{V_{ol} \sqrt{2m(\xi_{\mathbf{k}} + \mu)}}{2\pi^2} \frac{1}{(\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}} \quad (60)$$

Como a formação do par ligado se dá na superfície de Fermi, tem-se que  $\sqrt{2m\epsilon_{\mathbf{k}}} = k_f$ . Nessas condições, há uma constante de densidade de estado dada por  $N(0) = \frac{V_{ol} E_f}{\pi^2}$ , simplificando a integral na forma

$$\frac{1}{VN(0)} = \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi_{\mathbf{k}} \frac{1}{(\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}} \quad (61)$$

A integral acima é resolvida algebricamente no Apêndice B e gera um valor aproximado para o parâmetro de ordem. Essa aproximação é devida ao acoplamento fraco,  $VN(0) < 0,3$  como visto na literatura [7]

$$\Delta \cong 2\hbar\omega_c e^{-\frac{1}{VN(0)}} \quad (62)$$

Com o parâmetro de ordem (Gap de energia) definido, pode-se encontrar os parâmetros  $u_{\mathbf{k}}$  e  $\nu_{\mathbf{k}}$  que especificam a função de onda da teoria BCS. Ao usar-se o sistema dado pela condição inicial dos parâmetros e pela equação (53), chega-se a

$$\begin{aligned} \nu_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}}^2 &= 1 \\ \nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 &= -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (63)$$

assim,

$$\begin{aligned} \nu_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \\ u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \end{aligned} \quad (64)$$

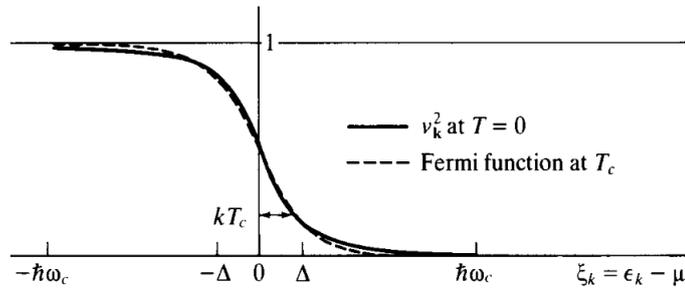


Figura 5: Probabilidade de formação de um par de elétrons ligado em função de sua energia de quase-partícula

### 3.2.2 Energia no Estado Fundamental

Com os parâmetros no estado fundamental ( $|\psi_G\rangle$ ) calculados, tem-se condições de voltar a energia total do sistema  $\langle \mathcal{H} \rangle$  e saber se ela é menor ou maior que a energia no estado normal. Ao retomar-se a equação (45) pode-se substituir o termo cinético pela equação (64) e o termo de acoplamento pela equação (50)

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left( \xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \quad (65)$$

Para o estado normal,  $\Delta = 0$ , a energia de dispersão é  $E_{\mathbf{k}} = |\xi_{\mathbf{k}}|$ , e apresenta duas condições distintas para energia de dispersão: uma para  $|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f$ , dando  $\xi_{\mathbf{k}} < 0$ , tornando a divisão  $\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} = -1$ ; e outra para  $|\mathbf{k}| > \mathbf{k}_f$ , dando  $\xi_{\mathbf{k}} > 0$ , tornando a divisão  $\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} = 1$ . Pode-se, então, dividir o somatório em duas partes

$$\langle \mathcal{H} \rangle_n = \sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f} \xi_{\mathbf{k}} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) + \sum_{|\mathbf{k}| > \mathbf{k}_f} \xi_{\mathbf{k}} \left( 1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) = \sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f} 2\xi_{\mathbf{k}} \quad (66)$$

Ao proceder-se da mesma forma para o estado supercondutor, divide-se o somatório em duas partes

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s = \sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f} \left( -\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{|\mathbf{k}| > \mathbf{k}_f} \left( \xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \quad (67)$$

Ao calcular a diferença de energia do estado supercondutor em relação ao normal, obtem-se

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = \sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f} \left( -\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{|\mathbf{k}| > \mathbf{k}_f} \left( \xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} - \sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f} 2\xi_{\mathbf{k}} \quad (68)$$

A simetria sobre a energia de fermi implica em  $\sum_{|\mathbf{k}| < \mathbf{k}_f} (-\xi_{\mathbf{k}}) = \sum_{|\mathbf{k}| > \mathbf{k}_f} (\xi_{\mathbf{k}})$ , assim

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = 2 \sum_{|\mathbf{k}| > \mathbf{k}_f} \left( \xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\Delta^2}{V}. \quad (69)$$

Ao substituir-se o somatório, como feito a partir da equação (58), e o termo do Gap, como na expressão (61), chega-se à

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = 2N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \xi_{\mathbf{k}} d\xi_{\mathbf{k}} - 2N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} - N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_{\mathbf{k}} \frac{\Delta^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}} \quad (70)$$

Agora, tem-se três integrais a serem resolvidas. A primeira é trivial e a segunda pode se somar, e diminuir  $\Delta^2$ , abrindo o numerador em duas integrais distintas

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = 2N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_{\mathbf{k}} \left( \xi_{\mathbf{k}} - \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} - \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}} \right) \quad (71)$$

Pode-se simplificar a equação na forma

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = 2N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_{\mathbf{k}} \left( \xi_{\mathbf{k}} - \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right) \quad (72)$$

A integral acima pode ser resolvida, gerando

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = N(0)(\hbar\omega_D)^2 - N(0)(\hbar\omega_D)^2 \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^2} \quad (73)$$

Ao realizar uma expansão de Taylor do tipo  $\sqrt{1+x^2}$  para  $x$  tendendo a zero, dado que  $\hbar\omega_D \gg \Delta$ , tem-se

$$\langle \mathcal{H} \rangle_s - \langle \mathcal{H} \rangle_n = -\frac{1}{2}N(0)\Delta^2 + \frac{1}{8} \left( \frac{\Delta^2}{\hbar\omega_D} \right)^2 + \mathcal{O} \left( \frac{\Delta^6}{(\hbar\omega_D)^4} \right) \quad (74)$$

Essa diferença de energia é conhecida como energia de condensação em temperatura nula. Esse resultado é de suma importância para teoria BCS da supercondutividade, que encontra o mesmo resultado de energia encontrado no estudo termodinâmico do efeito Meissner expresso na equação (3) para  $T = 0$ .

### 3.2.3 Transformação Canônica

A teoria BCS da supercondutividade, ao descrever a equação para o estado fundamental, foi capaz de determinar os coeficientes da função de onda e avaliar a energia de condensação no estado fundamental usando o método variacional. Porém, esse método torna-se mais complexo quando é preciso determinar a energia do sistema com estados excitados. Nikolai Bogoliubov e J. G. Valatin propuseram, no mesmo ano e de forma independente, um novo método para a teoria da supercondutividade [26, 27]. Um problema inicial na teoria de muitos corpos com interações é que geralmente é difícil de resolver com precisão. Na Hamiltoniana da teoria BCS tem-se a presença de um termo quártico ( $c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow}$ ) no termo de interação, o que necessita de uma abordagem aproximativa. O método empregado por Bogoliubov e Valatin foi o da aproximação de campo médio que em linhas gerais consiste na substituição de um sistema de 'n' corpos por um problema com um corpo com uma boa seleção de campo externo. Na

teoria de campos médios, o hamiltoniano pode ser expandido como magnitude das flutuações em torno da média do campo, o que coincide com a ideia de que se está substituindo todas as interações por um campo médio.

A teoria BCS considera que no estado fundamental tem-se uma superposição de estados  $|\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \downarrow\rangle$  ocupados e desocupados, simultaneamente, com uma coerência de fase. O método proposto pelos físicos soviéticos consiste em fazer uma aproximação de campo médio através de uma transformação canônica. Ao substituir na Hamiltonina (42) o par de Cooper por  $c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} = b_{\mathbf{k}} + (c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} - b_{\mathbf{k}})$ , o termo dentro do parêntese se torna uma pequena flutuação ( $\delta b_{\mathbf{k}}$ ), ou desvio da média, já que  $b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$  representa o valor esperado para criação ou aniquilação de um par de partícula.

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathbf{V}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \left\{ [b_{\mathbf{k}}^* + (\delta b_{\mathbf{k}}^*)] [b_{\mathbf{l}} - (\delta b_{\mathbf{l}})] \right\} \quad (75)$$

Como a flutuação é muito pequena, despreza-se os termos quadráticos dados por  $\delta b^2$  assim a Hamiltoniana perderá os termos quárticos ficando apenas com termos quadráticos. Essa aproximação faz com que a Hamiltonina perca sua conservação no número de partículas, mas há duas formas de resolver esse impasse: a primeira seria fixando um valor esperado de número de partículas ( $\langle N \rangle$ ), ao introduzir o potencial químico; e a segunda um pouco mais elegante ao integrar sobre uma fase  $\varphi$  para a função macroscópica.

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathbf{V}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* b_{\mathbf{l}} + b_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} - b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{l}}) \quad (76)$$

As equações do parâmetro de ordem dadas em (50) mostra-nos como mudar a forma de reescrever a Hamiltoniana depois da aproximação de campo médio, fazendo com que o parâmetro de ordem apareça com a informação de onde partir. Ao calcular-se os valores esperados no Apêndice A, tem-se  $u_{\mathbf{l}}\nu_{\mathbf{l}} = \langle c_{-\mathbf{l}\downarrow}c_{\mathbf{l}\uparrow} \rangle$ . Pode-se, então, substituir na Hamiltoniana o termo  $\sum_{\mathbf{l}} \mathbf{V}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} b_{\mathbf{l}} = -\Delta_{\mathbf{k}}$ , assim, obtém-se a Hamiltoniana na forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* + \Delta_{\mathbf{l}}^* c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*) \quad (77)$$

Até aqui não há nada de novo, a genialidade da transformação de Bogoliubov-Valatin vem na transformação dos operadores de criação e destruição na forma,

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^* & c_{\mathbf{k}\uparrow}^* &= u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* + \nu_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* &= -\nu_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^* & c_{-\mathbf{k}\downarrow} &= -\nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* + u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \end{aligned} \quad (78)$$

Os coeficientes  $u_{\mathbf{k}}$  e  $\nu_{\mathbf{k}}$  respeitam a condição  $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 = 1$  e pode-se observar que

o termo  $\gamma_{k\mu}$  tem o papel de contribuir com a criação e destruição dos elétrons, respeitando a relação de momento e de spin. Os operadores  $\gamma_{k0}$  e  $\gamma_{k1}^*$  têm relação com a destruição  $k \uparrow$  e criação de  $-k \downarrow$ , ou seja, fazem uma transformação reduzindo  $S_z$  por  $\hbar/2$ . Logo, os operadores  $\gamma_{k0}^*$  e  $\gamma_{k1}$  tem relação com a destruição  $-k \downarrow$  e criação de  $k \uparrow$ , ou seja, faz uma transformação aumentando  $S_z$  por  $\hbar/2$ . Agora pode-se fazer uma substituição na Hamiltoniana abrindo o termo  $\sigma$  e substituindo  $l$  por  $k$  já que estamos trabalhando com um espalhamento "elástico".

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}) - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*) \quad (79)$$

Todas as passagens estão detalhadas no apêndice C, nos dando a Hamiltoniana

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} [\epsilon_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2\epsilon_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^2 + 2\epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) \\ + \Delta_{\mathbf{k}} (\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) + 2\Delta_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1} - 1) + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*] \end{aligned} \quad (80)$$

Para que a transformação de Bogoliubov-Valatin seja válida, ou seja, diagonalize a Hamiltoniana, precisa-se de que os termos cruzados ( $\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*$ ) sejam nulos. Com isso, pode-se escolher os parâmetros dados por  $\nu_{\mathbf{k}}$  e  $u_{\mathbf{k}}$  que façam isso acontecer. Tem-se então

$$2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} (\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) = 0 \quad (81)$$

Ao multiplicar-se a equação acima por  $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}^2}$  e somar ambos os lados por  $\xi_{\mathbf{k}}^2$ , obtém-se

$$\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 = \Delta_{\mathbf{k}}^2 \frac{\nu_{\mathbf{k}}^2}{u_{\mathbf{k}}^2} + 2\Delta_{\mathbf{k}} \frac{\nu_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}^2 \quad (82)$$

O lado direito da equação é um quadrado perfeito. Isola-se os parâmetros e usa-se as relações dadas em (53) tem-se

$$\frac{\nu_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}} = \frac{1 + \nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2}{2\nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}} \quad (83)$$

Pode-se observar que o resultado dessa equação volta a relação  $\nu_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}}^2 = 1$  nos dando solução para  $\nu_{\mathbf{k}}$  e  $u_{\mathbf{k}}$  iguais a encontrada no método variacional representada na equação (64) por

$$|\nu_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) = 1 - |u_{\mathbf{k}}|^2 \quad (84)$$

### 3.2.4 Estados Excitados

O método resolvido por transformações canônicas não só possibilitou chegar-se ao mesmo resultado do estado fundamental feito no artigo original da teoria BCS, método variacional, como facilitou trabalhar-se os estados excitados. Ao retomar-se a equação (80), retirando os termos que não diagonalizam a Hamiltoniana efetiva, tem-se

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left( \xi_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}} \right) \left( \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \right) + 2\xi_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}^2 - 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}}^* \right] \quad (85)$$

com a escolha de  $u_{\mathbf{k}}$  e  $\nu_{\mathbf{k}}$  que diagonaliza a Hamiltoniana, tem-se, pela equação (53, 64, 84) que os termos  $\xi_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}$  são iguais a  $E_{\mathbf{k}}$  e da mesma forma  $2\xi_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}^2 - 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}$  pode ser simplificado por  $\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$ . Substituindo  $b_{\mathbf{k}}^*$  por  $-1/E_{\mathbf{k}}$  define-se um novo operador número da forma  $\eta_{\mathbf{k}\rho} = \gamma_{\mathbf{k}\rho}^* \gamma_{\mathbf{k}\rho}$ , obtém-se

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left( \xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\eta_{\mathbf{k}0} + \eta_{\mathbf{k}1}) \quad (86)$$

Ao olhar-se para as equações (69) ou (72), percebe-se que esse primeiro somatório é uma constante para  $T = 0$ , exatamente igual a energia de condensação do sistema equação (74). Então, o que significa o outro somatório que aparece com o método de transformação canônica, só será verdade se ao aplicar-se o estado fundamental da função de onda da teoria BCS, ele represente o estado de vácuo em relação ao operador número  $\eta_{\mathbf{k}\rho}$ , assim, como quando se aplica o operador número  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  no vácuo definido anteriormente como o mar de Fermi ( $|\phi_0\rangle$ ).

O segundo termo, então, será responsável por um incremento de energia no sistema acima do estado fundamental, o qual descreve excitações da quase-partículas dadas por  $E_{\mathbf{k}} = (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)^{1/2}$ . Sabe-se que a menor energia possível no estado superconductor é dado por  $E_{\mathbf{k}} = |\Delta| > 0$  e o termo de quase-partícula é definido como uma energia de excitação elementar. Ao retomar-se a definição do Gap de energia na equação (50), substitui-se o operador de criação/aniquilação ( $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ) pelos de excitação ( $\gamma_{\mathbf{k}\rho}$ ) da quase-partícula dados em (78).

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \langle c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} \rangle = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \langle -\nu_{\mathbf{l}} u_{\mathbf{l}}^* \gamma_{\mathbf{l}0}^* \gamma_{\mathbf{l}0} - |\nu_{\mathbf{l}}|^2 \gamma_{\mathbf{l}0}^* \gamma_{\mathbf{l}1}^* + |u_{\mathbf{l}}|^2 \gamma_{\mathbf{l}1} \gamma_{\mathbf{l}0} + u_{\mathbf{l}}^* \nu_{\mathbf{l}} \gamma_{\mathbf{l}1} \gamma_{\mathbf{l}1}^* \rangle \quad (87)$$

Necessita-se descartar os termos não diagonais dos operadores de excitação e usar a propriedade  $\{\gamma_{\mathbf{l}\rho}^* \gamma_{\mathbf{l}\rho}\} = \delta_{\mathbf{l}} \delta_{\rho}$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \langle c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} \rangle = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} u_{\mathbf{l}}^* v_{\mathbf{l}} \langle -\gamma_{\mathbf{l}0}^* \gamma_{\mathbf{l}0} - \gamma_{\mathbf{l}1}^* \gamma_{\mathbf{l}1} + 1 \rangle \quad (88)$$

Pode-se ver que ao não ter excitação da quase-partícula no sistema, o parâmetro de ordem volta ao seu estado encontrado pelo método variacional, expresso em (50) e calculado em (62) em função da frequência de Debye e do acoplamento.

### 3.2.5 Temperatura Crítica

A responsável pela energia de excitação no estado supercondutor é a energia de quase-partícula  $E_{\mathbf{k}}$ , na qual a mesma deve ser uma quantidade positiva. A probabilidade de existir uma excitação em equilíbrio térmico é dado pela distribuição de Fermi-Dirac, e como já visto  $\eta_{\mathbf{k}\rho}$  é de fato responsável por essa excitação, defini-se a função

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{(e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1)} = \langle \eta_{\mathbf{k}\rho} \rangle \quad (89)$$

Ao garantir que a energia de quase-partícula é sempre positiva, quando a temperatura vai a zero para todo  $\mathbf{k}$ , a função também vai a zero, o que satisfaz a condição inicial. Ao reescrever a equação (88) tem-se

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} u_{\mathbf{l}}^* v_{\mathbf{l}} (1 - 2f(E_{\mathbf{l}})) \quad (90)$$

Ao substituir os operadores  $u_{\mathbf{l}}^* v_{\mathbf{l}}$  pela relação descrita em (53) e pela definição de distribuição de Fermi-Dirac, tem-se

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \frac{(e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1)}{(e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1)} = - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} V_{\mathbf{kl}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \quad (91)$$

As condições expressas em (55) para o acoplamento e as condições expressas em (56) para o parâmetro de ordem, substituída a expressão  $\beta = \frac{1}{k_b T}$ , tem-se

$$\frac{2}{V} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_b T}\right) \quad (92)$$

A equação de tangente hiperbólica é bem definida em seus extremos, convergindo rapidamente a um. Conforme a temperatura vai se aproximando de zero, a expressão  $\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_b T}$  tende a infinito e a tangente hiperbólica a um. Nesse caso volta-se a equação (57). Nessa equação encontra-se a temperatura crítica do sistema em função de seu acoplamento. No momento da

transição de fase do sistema normal para o supercondutor, o parâmetro de ordem ( $\Delta$ ) é igual a zero. Tem-se então a existência de uma dependência entre o parâmetro de ordem e a temperatura do sistema com  $\Delta(T_c) = 0$ , assim, a energia de quase-partícula ( $E_{\mathbf{k}}$ ) se torna-se o módulo da dispersão ( $|\xi_{\mathbf{k}}|$ )

$$\frac{2}{V} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \tanh\left(\frac{|\xi_{\mathbf{k}}|}{2k_b T_c}\right) \quad (93)$$

Ao utilizar-se os mesmos passos para substituir o somatório sobre os momentos para uma integral na energia de dispersão feito entre as equações (58) a (61), a integral a ser resolvida se torna-se

$$\frac{1}{VN(0)} = \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \tanh\left(\frac{|\xi_{\mathbf{k}}|}{2k_b T_c}\right) \quad (94)$$

A integral acima será resolvida algebricamente no Apêndice D

$$k_b T_c = 1.134 \hbar \omega_c e^{-\frac{1}{VN(0)}} \quad (95)$$

Pode-se comparar essa energia encontrada com Gap de energia no estado fundamental

$$\frac{\Delta(0)}{k_b T_c} = 1,764 \quad \text{ou} \quad \frac{2\Delta(0)}{k_b T_c} = 3,528 \quad (96)$$

Este resultado que relaciona a largura do Gap de energia e a energia do sistema com relação à temperatura de transição de fase é importante para a validação da teoria BCS no limite de acoplamento fraco, pois independente de qualquer parâmetro da teoria, esse resultado pode ser facilmente testado experimentalmente.

### 3.2.6 Gap dependente da Temperatura

Retomada a equação (92) com suas devidas modificações, tem-se

$$\frac{1}{VN(0)} = \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{(\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}} \tanh\left(\frac{(\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}}{2k_b T}\right) \quad (97)$$

A equação (97) deve ser modificada para conseguir obter um resultado numérico. Coloca-se, para isso,  $\Delta$  em evidência e realiza-se uma mudança de variável na forma  $x = \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\Delta}$ , logo,  $d\xi_{\mathbf{k}} = \Delta dx$  eliminando o parâmetro de ordem do termo fora da tangente hiperbólica. Ao fazer a mudança de variável o intervalo de integração também se transforma da forma

$$\frac{1}{VN(0)} = \int_0^{\frac{\hbar\omega_c}{\Delta}} dx \frac{1}{(x^2 + 1)^{1/2}} \tanh\left(\frac{\Delta(x^2 + 1)^{1/2}}{2k_bT}\right) \quad (98)$$

Multiplica-se  $\Delta_0/\Delta_0$  dentro da tangente hiperbólica e do intervalo de integração, no qual  $\Delta_0 = 1,764k_bT_c$  é o parâmetro de ordem em temperatura nula, obtendo a expressão  $\frac{1}{2} \frac{1,764k_bT_c}{k_bT} \frac{\Delta}{\Delta_0}$ . Chama-se  $\frac{T}{T_c} = \tau$  e  $\frac{\Delta}{\Delta_0} = \delta$ . Outra mudança significativa é no intervalo de integração que ficará expressa como  $\frac{\hbar\omega_c}{\Delta_0} \frac{\Delta_0}{\Delta} = \frac{e^{\frac{1}{VN(0)}}}{2\delta}$ , e usa-se a equação (62) para substituir  $\Delta_0$ , obtendo

$$\frac{1}{VN(0)} = \int_0^{\frac{e^{\frac{1}{VN(0)}}}{2\delta}} dx \frac{1}{(x^2 + 1)^{1/2}} \tanh\left(\frac{1,764}{2} \frac{\delta}{\tau} (x^2 + 1)^{1/2}\right) \quad (99)$$

Algumas considerações podem ser feitas. Pode-se avaliar o que acontece com essa expressão em dois extremos distintos: um para  $\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1$ ; e outro para  $\frac{T}{T_c} \approx 1$ . A expressão  $\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)}$  é uma função de  $\frac{T}{T_c}$  a qual decai monotonicamente de 1 a 0 conforme a temperatura aumenta de zero até a temperatura crítica. Para temperatura perto de zero, a tangente hiperbólica varia muito pouco. Quando  $T$  começa a chegar perto de  $T_c$  as quase-partículas começam a ser excitadas termicamente e o parâmetro de ordem cai a zero rapidamente.

Para aproximações de campo médios, uma equação que relaciona o parâmetro de ordem e a raiz da diferença de temperatura  $T - T_c \approx 0$  pode ser escrita na forma [7]

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1,76 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2} \quad (100)$$

Tem-se, então, o comportamento do parâmetro de ordem em função da temperatura dado no gráfico abaixo

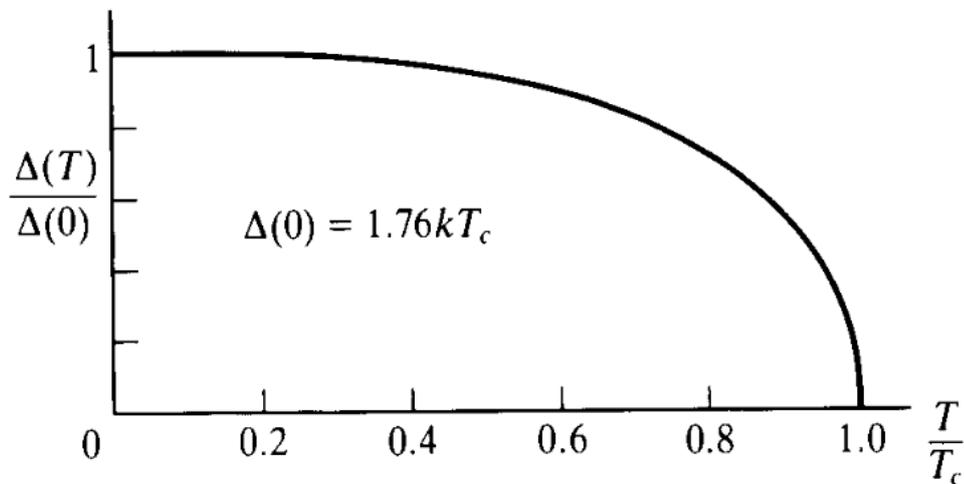


Figura 6: Gap de energia dependente da temperatura

## 4 Supercondutividade em duas Bandas

Depois de quarenta e seis anos, Bardeen, Cooper e Schrieffer foram capazes de responder muitas perguntas que intrigavam a comunidade científica sobre a supercondutividade, lhes rendendo o Prêmio Nobel em 1972. Com o paradigma da teoria da supercondutividade em baixas temperaturas definido, o aprofundamento do estudo se fazia necessário para o avanço da ciência normal. Em seu princípio a supercondutividade era entendida apenas como um condutor perfeito, com isso algumas descobertas nesse processo foram de suma importância para a construção da teoria e outras nem tanto. Nesse mesmo interim foram descobertas ligas metálicas com propriedades supercondutoras que apresentavam temperatura crítica mais elevada que metais puros e suportavam um campo magnético externo mais elevado. Com a teoria BCS em mãos, o primeiro estudo que atacava esses elementos foi proposto pelos físicos H. Suhl, B. T. Matthias e L. R. Walker em 1959. Eles propuseram um modelo onde duas bandas distintas se sobrepunham.

A teoria BCS é capaz de descrever um modelo de uma banda, considerando apenas um tipo de quase-partícula. A função de onda é descrita para que elétrons no nível de Fermi contribuam igualmente para a condensação e formação do Gap de energia. Se uma dada amostra tiver elétrons de condução no nível  $d$  ligados a banda de condução com nível  $s$ , fica difícil de afirmar que apenas uma função de onda contribua para o sistema da mesma forma. Analogamente à teoria BCS, Suhl, Matthias e Walker propuseram uma Hamiltoniana que levava em conta o efeito eletron-fónon inter-banda e intra-banda, mesmo não se tendo referência sobre o efeito eletron-fónon na Hamiltoniana BCS ela é implícita ao estado ligado entre os pares de Cooper, formando uma hamiltoniana com interação  $ss$ ,  $dd$  e  $sd$  [28].

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}d} d_{\mathbf{k}\sigma}^* d_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathbf{V}_{ss} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \\ & - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathbf{V}_{dd} d_{\mathbf{k}\uparrow}^* d_{-\mathbf{k}\downarrow}^* d_{-\mathbf{k}'\downarrow} d_{\mathbf{k}'\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathbf{V}_{sd} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* d_{-\mathbf{k}'\downarrow} d_{\mathbf{k}'\uparrow} + d_{\mathbf{k}\uparrow}^* d_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}) \end{aligned} \quad (101)$$

Na qual  $\epsilon_{\mathbf{k}s}$  e  $\epsilon_{\mathbf{k}d}$  são as relações de dispersão dos elétrons nas bandas  $s$  e  $d$  respectivamente, e  $\mathbf{V}_{ss}$ ,  $\mathbf{V}_{dd}$  e  $\mathbf{V}_{sd}$  são as médias das energias de interação resultante da emissão e absorção da emissão de um fónon nos processos  $s - s$ ,  $d - d$  e  $s - d$  respectivamente, também chamados de interações atrativas na visualização facilitada do modelo. Assim como a teoria BCS, Suhl e seus colaboradores assumiram a soma para todo vetor de onda possível ( $\mathbf{k}$ ) com uma pequena diferença entre bandas já que a superfície de Fermi de cada orbital é diferente.

Usando o método de Bogoliubov, para parâmetros diferentes  $\nu_{\mathbf{k}s} = \cos(\theta_{\mathbf{k}})$  e  $\nu_{\mathbf{k}d} =$

$\cos(\varphi_{\mathbf{k}})$  ele tirou três importantes conclusões. A primeira para o caso inter-banda  $V_{ss} = V_{dd} = 0$ , ou seja, para o caso da supercondutividade existir apenas com a interação entre a banda de condução  $s$  e  $d$  a temperatura crítica é a mesma encontrada seguindo a hamiltonina BCS, mas com densidade de estado  $\sqrt{N_s N_d}$ . A segunda conclusão se dá para o caso intra banda  $V_{sd} = 0$ , onde a supercondutividade é alcançada apenas pelas interações entre os elétrons de condução da mesma banda, e foram encontradas duas temperaturas críticas de transição, uma referente a cada banda de condução. E por último, o caso onde  $V_{sd}^2 \ll V_{ss} V_{dd}$  o sistema apresentou uma única temperatura crítica, que está entre  $T_{c1}$  e  $T_{c2}$  exceto na transição de fase onde  $T_c = T_{c2}$ .

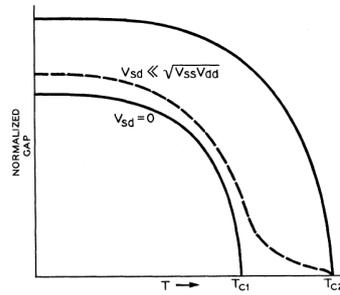


Figura 7: Comportamento do Parâmetro de ordem(Gap) normalizado com relação a temperatura [28]

Como as conclusões Suhl e seus colaboradores afirmaram que seus resultados obviamente podem ser generalizados para estruturas de multi-bandas, o modelo também foi capaz de explicar as regras segundo as quais as temperaturas de transição máximas para supercondutores  $s - d$  são observadas em concentrações de elétrons de condução correspondentes a pelo menos alguns dos máximos na curva  $N_d$ . Mesmo que os elétrons  $d$  não possam participar diretamente no fenômeno da supercondutividade ( $Vd = 0$ ), os elétrons  $s$  podem se beneficiar da maior densidade de estados na banda  $d$ .

## 4.1 Supercondutores de Altas Temperaturas

Em 1986 Johannes Georg Bednorz e Karl Alexander Müller conseguiram obter supercondutividade em um composto de óxido de bário, lantânio e cobre a uma temperatura de 35K, o que se pensava que só era possível atingir a supercondutividade a 20K como encontrado em ligas à base de nióbio. Com isso abriu-se uma corrida para descoberta de novos materiais cerâmicos supercondutores como mostrado na figura abaixo.

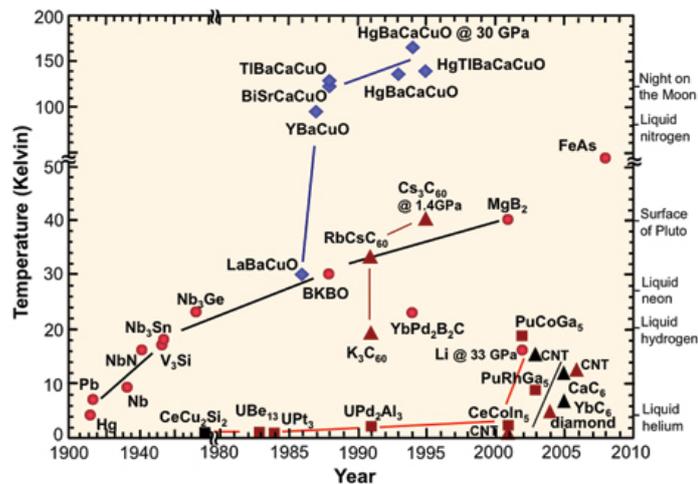


Figura 8: Relação de temperatura de transição e ano de descoberta[29]

A liga metálica Diboreto de magnésio  $MgB_2$  é conhecida desde a década de cinquenta, mas apenas em 2001 ele foi especificado como uma liga supercondutora com temperatura de transição de 39K [29, 30]. O que torna a descoberta do  $MgB_2$  tão importante, já que se tinha materiais supercondutores com  $T_c$  mais elevados, é a sua correspondência com a teoria BCS. Com uma estrutura hexagonal, apresenta calor específico anômalo e alta temperatura de transição. Considerado o mais alto valor possível de temperatura de transição de materiais que se tornam supercondutores por emparelhamento causado pela interação elétron-fóton (que explicava supercondutores de baixa temperatura e não se aplica a materiais com alto valor de  $T_c$ ), e ao mesmo tempo a falha da teoria ao prever um limite superior para a  $T_c$  de fase supercondutora e ao descartar a possibilidade de coexistência entre supercondutividade e ferromagnetismo.

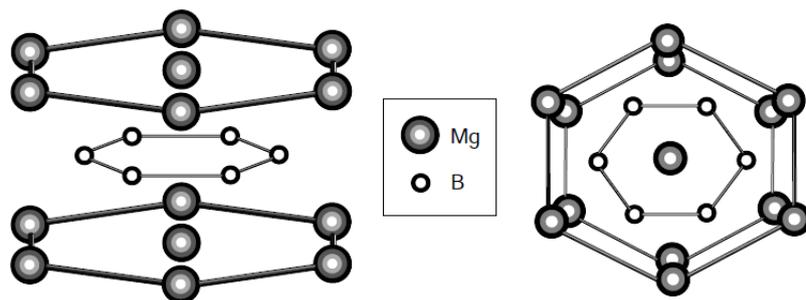


Figura 9: Estrutura Hexagonal da liga  $MgB_2$  [29]

Com uma descoberta tão inusitada uma melhora na produção da liga deve ser realizada. Os dois elementos envolvidos possuem uma diferença enorme na temperatura de fusão, sendo de 650°C para o Magnésio e mais de 2000°C para o Boro, porém como o magnésio evapora

perto dos  $1000^{\circ}\text{C}$  a alternativa para produção foi selar um pedaço de magnésio e algum de boro em pó dentro de um recipiente de tântalo, que é inerte e sujeitá-los a uma temperatura alta o suficiente para derreter, mas não para ferver o magnésio como  $950^{\circ}\text{C}$ . O magnésio tem uma pressão de vapor relativamente alta, um terço de um atm e o vapor de magnésio co-existe em equilíbrio com o metal líquido a  $950$  graus C. Espera-se que este vapor denso se espalhe para o boro sólido, produzindo pastilhas de  $\text{MgB}_2$ . Em duas horas este processo produz  $\text{MgB}_2$  de alta pureza na forma de uma pastilha que se apresenta como um material duro e quebradiço [31].

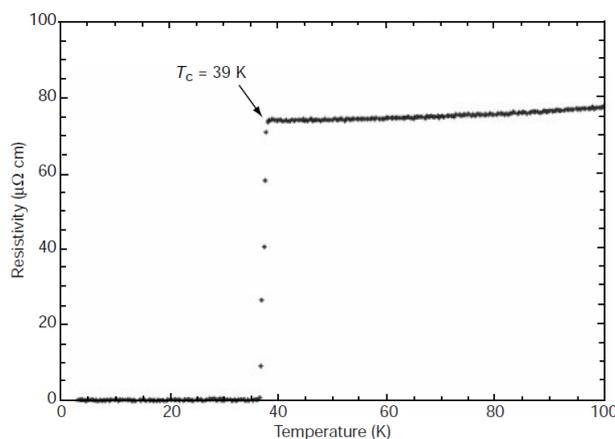


Figura 10: Dependência da resistência pela temperatura do  $\text{MgB}_2$  para campo magnético externo nulo ( $H = 0$ ) [29]

Um teste experimental pode dizer se um supercondutor pode ser explicado pela teoria BCS. Um papel chave na teoria é desempenhado pelas vibrações da rede. O boro possui dois isótopos estáveis, que ocorrem naturalmente, o boro 10 e o boro 11. A predição mais simples do modelo BCS é que  $T_c$  deve diferir em  $0,85\text{K}$  para duas amostras de  $\text{MgB}_2$  feitas com boro puro 10 e boro 11. Descobriu-se uma mudança de  $1\text{K}$ . A mudança na  $T_c$  foi um pouco maior do que a predição feita pela teoria BCS mostrando que as vibrações do boro são mais importantes para a supercondutividade do que as vibrações de magnésio, assim o Boro que apresenta massa menor que o magnésio possibilitando uma maior modificação na rede que é demonstrado pelo efeito isótopo [31].

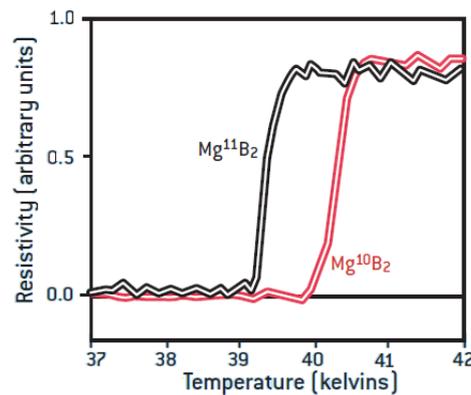


Figura 11: Efeito Isótopo para o Boro 10 e 11 [31]

O diboreto de magnésio difere dos supercondutores metálicos comuns de várias maneiras importantes, incluindo a falha dos modelos convencionais, sua temperatura de transição incommumente alta, os efeitos da substituição do isótopo na temperatura de transição crítica e o seu calor específico anômalo. Alguns estudos experimentais iniciais indicaram que o MgB<sub>2</sub> tem múltiplos Gaps [32, 33, 34, 35, 36, 37, 38], mas os estudos teóricos anteriores não explicaram a partir dos primeiros princípios a origem dessas lacunas e seus efeitos. Foi mostrado que a superfície de Fermi para esse material possui duas bandas de condução, a banda  $\pi$  formada pelo orbital  $p_z$  e a banda  $\sigma$  formada pela combinação dos orbitais  $p_x$  e  $p_y$  do Boro [39]. Uma característica importante é que os estados eletrônicos dominados por orbitais no plano do boro acoplam fortemente a modos específicos de fônons, tornando a formação de pares favorável e podendo explicar a alta temperatura de transição e a estrutura anômala no calor específico. Algumas análises sugerem que temperaturas de transição comparáveis ou superiores podem resultar em materiais em camadas baseados em B, C e N com orbitais planos parcialmente preenchidos.

Embora três orbitais determinem a superfície de Fermi, é interessante notar que apenas dois Gaps BCS diferentes são observados. Isso ocorre porque dois dos três orbitais se hibridizam um com o outro e determinam uma única banda, que se encaixa fortemente com a rede de fônons aumentando o Gap supercondutor da banda  $\sigma$ . Como o orbital  $p_z$  não se hibridiza para formar a banda  $\pi$  esse processo causa uma fraca interação com os fônons da rede produzindo um Gap supercondutor menor que da banda  $\sigma$  na superfície de Fermi. Assim, o número de Gaps diferentes que surgem nos sistemas multi-orbitais estão diretamente relacionado ao nível de hibridização entre os orbitais presentes em um determinado material. Desta forma, torna-se claro que a hibridização desempenha um papel importante na física dos supercondutores multi-bandas [40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47]. A hibridização dos orbitais pode se dar de uma forma simétrica ou anti-simétrica. Demonstrou-se que a hibridização simétrica atua em detrimento

da interação intra-banda [48, 49] e surpreendentemente a hibridização anti-simétrica aumenta a supercondutividade [50].

## 4.2 Modelo

Estudaremos o surgimento de uma onda  $p$  induzida devido a hibridização de duas bandas simples, digamos  $a$  e  $b$ . Consideraremos interações supercondutoras apenas dentro de cada banda, o que resultará interações supercondutoras intra-banda gerando os parâmetros de ordem  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$ . Nosso principal interesse aqui é a geração controlada (de supercondutores convencionais de onda  $s$ ) de um emparelhamento de gap de onda  $p$ , motivada por suas recentes características descobertas por Kitaev [51, 52]: que mostram que supercondutores unidimensionais de onda  $p$  pode hospedar férmions de Majorana (ou, entendidos também, como estado de energia igual a zero). Devido ao fato de que os férmions de Majorana são topologicamente protegidos e que satisfazem um critério de robustez para uso em computadores quânticos topológicos, eles são candidatos promissores para atuar como bits de memória.

Aqui apresentaremos o sistema que descreve a hibridização das bandas  $s$  em  $p$ . Este sistema pode ser entendido em diferentes cenários, como na matéria condensada ou no contexto de átomos frios, onde uma rede bipartida com órbitas  $s$  e  $p$  em diferentes sub-redes se hibridizam [54, 55]. O Hamiltoniano efetivo do sistema será descrito pelo modelo de segunda quantização para um supercondutor de duas bandas  $a$  e  $b$  já realizada uma aproximação de campo médio como feito para teoria BCS

$$\begin{aligned}
H_{ab} = \sum_{\mathbf{k}} & \left( \varepsilon_a(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \varepsilon_a(\mathbf{k}) a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} + \varepsilon_b(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\uparrow} + \varepsilon_b(\mathbf{k}) b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger b_{-\mathbf{k}\downarrow} \right. \\
& + V(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\uparrow} + V^*(\mathbf{k}) b_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\uparrow} + V(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger b_{\mathbf{k}\downarrow} + V^*(\mathbf{k}) b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} \\
& \left. + \Delta_a(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_a^*(\mathbf{k}) a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_b(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_b^*(\mathbf{k}) b_{-\mathbf{k}\downarrow} b_{\mathbf{k}\uparrow} \right) \\
& - \frac{\Delta_a^2}{g_a} - \frac{\Delta_b^2}{g_b}
\end{aligned} \tag{102}$$

O operador  $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  representa a criação de um elétron na banda  $a$  com momento  $\mathbf{k}$  e spin  $\sigma$  e similarmente o operador  $b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  para banda  $b$ . A energia cinética é dada pela banda de dispersão  $\varepsilon_\eta = \frac{k^2}{2m_\eta} - \mu_\eta$ , onde  $\eta = a, b$ , com  $m_\eta$  representando a massa do elétron.  $g_a$  e  $g_b$  são as constantes de acoplamento de interação entre os elétrons de suas bandas respectivamente. Para que possamos garantir um equilíbrio homogêneo, a ocupação eletrônica de diferentes

bandas terão o mesmo potencial químico  $\mu$ , mas definiremos um potencial químico efetivo como  $\mu_\eta = \mu + E_\eta$ , onde  $\eta$  representa a banda de condução e  $E_\eta$  o limite inferior da banda.

A hibridização  $V(\mathbf{k}) \equiv V_k$  aparece naturalmente se o emparelhamento supercondutor ocorrer em orbitais moleculares ou atômicos em que a energia cinética não é totalmente diagonal [56], como proposto para supercondutores ferro-pnictide (família do nitrogênio) [57]. Esse resultado também pode ser causado por uma disordem induzida para uma dispersão de banda. Os parâmetros de ordem supercondutor intra-banda (diagonal) é  $\Delta_{a,b}$ . Nós iremos assumir os estados supercondutores convencionais de spin-singlete, banda de condução  $s$ . Para essas considerações, os resultados se aplicam igualmente bem a qualquer emparelhamento intra-banda.

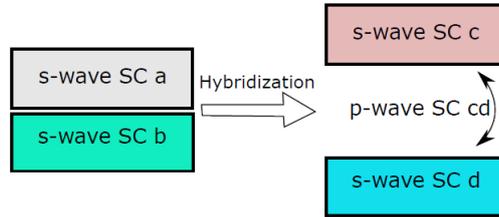


Figura 12: Configuração de indução e criação de onda  $p$  [58]

A figura 12 propõe a indução de um Gap supercondutor de onda- $p$  causado pela hibridização das bandas  $a$  e  $b$ . Dentro de cada uma dessas bandas, há supercondutividade intra-banda formada pelas ondas- $s$  e o emparelhamento dos Gaps  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$ . Depois de aplicar a hibridização  $V(k)$  antissimétrica que pode ser tanto realizado por pressão ou pelo efeito de dopagem a supercondutividade intra-banda continuará existindo, mas agora nomearemos como  $c$  e  $d$  dependentes de  $\Delta_a$ ,  $\Delta_b$  e  $V(k)$ . Além disso, há um surgimento de uma onda- $p$  induzida com Gap  $\Delta_{cd}$ .

Para um valor finito de hibridização  $V(k)$ , podemos diagonalizar a energia cinética obtendo uma Hamiltoniana diagonal em novos termos de bandas  $c$  e  $d$ , mas agora ambas as bandas que possuem supercondutividade intra banda terão parâmetros de ordem  $\Delta_c$  e  $\Delta_d$  e o parâmetro inter banda será dado por  $\Delta_{cd}$ . Podemos, então, escrever a Hamiltoniana como

$$\begin{aligned}
 H_{cd} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_c(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_d(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_c(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_d(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.} \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{cd}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{dc}(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}, \tag{103}
 \end{aligned}$$

Na qual  $\varepsilon_{c,d}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\varepsilon_{\mp}(\mathbf{k})^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2}$  e  $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) \equiv \frac{\varepsilon_a(\mathbf{k}) \pm \varepsilon_b(\mathbf{k})}{2}$ . Com isso, devemos definir os parâmetros de ordem como

$$\Delta_c(\mathbf{k}) = \frac{A^2 \Delta_a(\mathbf{k}) + V_{\mathbf{k}} V_{-\mathbf{k}} \Delta_b(\mathbf{k})}{A \sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}}, \quad (104)$$

para  $A \equiv \varepsilon_{-}(\mathbf{k}) + \sqrt{\varepsilon_{-}(\mathbf{k})^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2}$ ,

$$\Delta_d(\mathbf{k}) = \frac{A^2 \Delta_b(\mathbf{k}) + V_{\mathbf{k}}^* V_{-\mathbf{k}}^* \Delta_a(\mathbf{k})}{A \sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}}, \quad (105)$$

$$\Delta_{cd}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_b(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}} - \Delta_a(\mathbf{k}) V_{-\mathbf{k}}^*}{\sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}}, \quad (106)$$

$$\Delta_{dc}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_b(\mathbf{k}) V_{-\mathbf{k}} - \Delta_a(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}}. \quad (107)$$

Note que  $\Delta_c(V_k = 0) \rightarrow \Delta_a$ ,  $\Delta_d(V_k = 0) \rightarrow \Delta_b$  enquanto  $\Delta_{cd}(V_k = 0) \rightarrow 0$ , e  $\Delta_{dc}(V_k = 0) \rightarrow 0$ . Se nós tomarmos uma simetria  $V_{\mathbf{k}}$ , na qual  $V_{-\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}}$ , e  $V_{-\mathbf{k}}^* = V_{\mathbf{k}}$ , teremos

$$\Delta_{cd}(\mathbf{k}) = \Delta_{dc}(\mathbf{k}) = \frac{V_{\mathbf{k}}(\Delta_b(\mathbf{k}) - \Delta_a(\mathbf{k}))}{\sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}}. \quad (108)$$

Esse Gap corresponde a derivação do parâmetro apresentado por Black-Schaffer and Balatsky [59]. Para o caso de uma hibridização anti-simetria,  $V_{-\mathbf{k}} = -V_{\mathbf{k}}$ , nos dando

$$\Delta_{cd}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_b(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}} + \Delta_a(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}} \quad (109)$$

e

$$\Delta_{dc}(\mathbf{k}) = -\frac{\Delta_b(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}} + \Delta_a(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{(\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k}))^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}} \quad (110)$$

Além de ser anti-simétrica, a hibridização se apresenta como um imaginário puro [60]  $V_{\mathbf{k}} = i\gamma(\mathbf{k}_x k_x + \mathbf{k}_y k_y + \mathbf{k}_z k_z)$  (como aquele que surge em uma dimensão), No qual  $\gamma$  representa a força da hibridização, implicando em

$$\Delta_{cd}(\mathbf{k}) = \frac{V_{\mathbf{k}}(\Delta_b(\mathbf{k}) - \Delta_a(\mathbf{k}))}{2\sqrt{\delta\varepsilon^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2}} = -\Delta_{dc}(\mathbf{k}). \quad (111)$$

na qual definimos  $\delta\varepsilon = \frac{\varepsilon_b(\mathbf{k}) - \varepsilon_a(\mathbf{k})}{2} = \frac{\mu_a - \mu_b}{2} = \frac{E_a - E_b}{2}$ , desde que consideremos as massas dos elétrons das bandas  $a$  e  $b$  iguais ( $m_a = m_b$ ).

Como observamos anteriormente, os Gaps de inter-bandas (induzidas) desaparecem para  $V_{\mathbf{k}} = 0$ , ou seja, na ausência de hibridização, caso em que as bandas se comportam como duas bandas completamente independentes. Além disso, também é intrigante notar que esse gap de emparelhamento induzido inter-banda não surgirá no caso de Gaps interagentes de mesma magnitude, ou seja,  $\Delta_a(\mathbf{k}) = \Delta_b(\mathbf{k})$ , não importa quão forte seja a força da hibridização. Também vale a pena observar que os Gaps de emparelhamento na equação (111) são do tipo onda- $p$ , devido ao carácter antisimétrico de  $V_{\mathbf{k}}$ .

Ao retornar a Hamiltonina descrita na equação (102) podemos reescreve-la na forma matricial com bases  $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, b_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{-\mathbf{k}\downarrow}, b_{-\mathbf{k}\downarrow})$ , como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}} + 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \frac{\Delta_a^2}{g_a} - \frac{\Delta_b^2}{g_b} \quad (112)$$

No qual  $\mathcal{H}$  é a matriz abaixo

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_a(\mathbf{k}) & V_{\mathbf{k}}^* & \Delta_a^* & 0 \\ V_{\mathbf{k}} & \varepsilon_b(\mathbf{k}) & 0 & \Delta_b^* \\ \Delta_a & 0 & -\varepsilon_a(\mathbf{k}) & -V_{\mathbf{k}} \\ 0 & \Delta_b & -V_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (113)$$

A Hamiltoniana pode ser diagonalizada como

$$H = \sum_{\mathbf{k}, s=1,2} \left[ E_{\mathbf{k},s} \left( \alpha_{\mathbf{k},s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k},s} - 1 \right) + 2\varepsilon_+(\mathbf{k}) \right] - \frac{\Delta_a^2}{g_a} - \frac{\Delta_b^2}{g_b} \quad (114)$$

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2 \left( |\Delta_a|^2 + |\Delta_b|^2 + \varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2 \right) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ \left( |\Delta_a|^2 - |\Delta_b|^2 + \varepsilon_a^2 - \varepsilon_b^2 \right)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \left[ (\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 + \Delta_a^2 + \Delta_b^2 \right] - 4\Delta_a\Delta_b[V_{\mathbf{k}}^2 + V_{\mathbf{k}}^{\dagger 2}] \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (115)$$

O termo  $V_{\mathbf{k}}^2 + V_{\mathbf{k}}^{\dagger 2}$  pode ser entendido como a diferença entre a parte real e a parte ima-

ginária  $\text{Re}(2V_{\mathbf{k}}^2) - \text{Im}(2V_{\mathbf{k}}^2)$ . As duas outras energias das quase-partículas são  $E_{\mathbf{k},1} = -E_{\mathbf{k},3}$  e  $E_{\mathbf{k},2} = -E_{\mathbf{k},4}$  e afim de simplificar a notação ocultaremos o termo  $(\mathbf{k})$  da dispersão ficando com  $\varepsilon_{\eta}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\eta}$ . Estamos trabalhando em função das autos-energias de dispersão  $\varepsilon_a$  e  $\varepsilon_b$  que são interdependentes do momento de onda  $(\mathbf{k})$ . Faremos uma mudança de variável afim de facilitar as contas futuras, já que estaremos somando sobre todos os valores possíveis de  $\mathbf{k}$  e faremos uma mudança de base a exemplo da teoria BCS. Ao substituir nas auto energias de dispersão na forma  $\xi(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \frac{(\mu_a + \mu_b)}{2} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \bar{\mu} \equiv \xi$  teremos que

$$\begin{aligned} \varepsilon_a + \varepsilon_b &= 2\xi \\ \varepsilon_a - \varepsilon_b &= E_b - E_a \\ \varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2 &= 2(\xi^2 - \bar{\mu}^2) + \mu_a^2 + \mu_b^2 \\ \varepsilon_a^2 - \varepsilon_b^2 &= 4\xi\delta_{\bar{\mu}} \end{aligned} \quad (116)$$

Tendo  $\delta_{\bar{\mu}} = \frac{\mu_b - \mu_a}{2} = \frac{E_b - E_a}{2}$ .

Podemos obter a equação de Gap escrevendo a equação para o Grande Potencial Termodinâmico ( $\Omega = -\text{Tr}\{\ln e^{-\beta H}\}$ )

$$\Omega = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \left[ \varepsilon_{+}(\mathbf{k}) - E_{\mathbf{k},s} - \frac{2}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}) \right] - \frac{\Delta_a^2}{g_a} - \frac{\Delta_b^2}{g_b} \quad (117)$$

Para o caso mais geral precisamos minimizar o ensemble com respeito a  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$ , fazendo  $\frac{\partial \Omega}{\partial \Delta_{\alpha}} = 0$  com  $\alpha = a, b$  temos

$$\frac{\Delta_a}{g_a} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \left[ -\frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} - \frac{2}{(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}})} \frac{\partial e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}}{\partial \beta E_{\mathbf{k},s}} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} \right] \quad (118)$$

$$\frac{\Delta_b}{g_b} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \left[ -\frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} - \frac{2}{(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}})} \frac{\partial e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}}{\partial \beta E_{\mathbf{k},s}} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} \right] \quad (119)$$

Fazendo a derivada do termo exponencial e colocando a derivada da quase-partícula em evidência temos

$$\frac{\Delta_a}{g_a} = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} \left[ \frac{1 - e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}} \right] = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},s}}{2}\right) \quad (120)$$

$$\frac{\Delta_b}{g_b} = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} \left[ \frac{1 - e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}} \right] = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},s}}{2}\right) \quad (121)$$

Como estamos trabalhando no regime de temperatura nula, podemos perceber que nossa equação de Gap se resumirá

$$\frac{\Delta_a}{g_a} = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_a} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_a} \right] \quad (122)$$

$$\frac{\Delta_b}{g_b} = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_b} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_b} \right] \quad (123)$$

Faremos mais uma vez a substituição do somatório na forma  $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k}$  que por simetria esférica nos dará

$$\frac{\Delta_a}{g_a} = -\frac{1}{4} \frac{V}{2\pi^2} \int k^2 dk \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_a} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_a} \right] \quad (124)$$

$$\frac{\Delta_b}{g_b} = -\frac{1}{4} \frac{V}{2\pi^2} \int k^2 dk \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_b} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_b} \right] \quad (125)$$

Fazendo uma translação no eixo de integração podemos integrar sobre a energia  $\xi$  nos intervalos de  $-\omega$  a  $\omega$ . Substituindo  $k^2 = 2m(\xi + \bar{\mu})$  e  $dk = \frac{m}{\sqrt{2m(\xi + \bar{\mu})}} d\xi$  e pela simetria da função  $\xi$  temos

$$\frac{\Delta_a}{g_a} = \frac{1}{2} N_0 \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_a} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_a} \right] \quad (126)$$

$$\frac{\Delta_b}{g_b} = \frac{1}{2} N_0 \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_b} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_b} \right] \quad (127)$$

Onde  $N_0 = \frac{V_0 m \sqrt{2m\varepsilon_{a,b}}}{2\pi^2}$  é a densidade de estados e  $\sqrt{2m\varepsilon_{a,b}}$  o momento de Fermi e chamaremos  $\lambda_\eta = g_\eta N_0$ .

$$\frac{\Delta_a}{\lambda_a} = \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_a} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_a} \right] \quad (128)$$

$$\frac{\Delta_b}{\lambda_b} = \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\partial E_{\mathbf{k},1}}{\partial \Delta_b} + \frac{\partial E_{\mathbf{k},2}}{\partial \Delta_b} \right] \quad (129)$$

#### 4.2.1 Considerações sobre Hibridização e Gap de energia

Faremos algumas considerações para possibilidades de valores para Hibridização e para o parâmetro de ordem

##### - Hibridização nula

Podemos facilmente mostrar que quando  $V_{\mathbf{k}} = 0$

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k},1} &= \sqrt{\varepsilon_a^2 + |\Delta_a|^2} \\ E_{\mathbf{k},2} &= \sqrt{\varepsilon_b^2 + |\Delta_b|^2} \end{aligned} \quad (130)$$

que são a dispersão da quase-partícula dada pela teoria BCS para dois sistemas independentes, como era esperado.

### - Hibridização não nula e parâmetros de ordem nulos

Tomando  $V_{\mathbf{k}} \neq 0$  e  $\Delta_a = \Delta_b = 0$  temos apenas a interação interbanda com energia da quase-partícula dada por

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2(\varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ (\varepsilon_a^2 - \varepsilon_b^2)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 (\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (131)$$

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2(\varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ (\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 (\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 (\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 \right]^{1/2} \right\}^{1/2}$$

$$E_{\mathbf{k},s} = \sqrt{\left( \frac{\varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2}{2} \right) + |V_{\mathbf{k}}|^2 \pm \left( \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} \right) \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}} \quad (132)$$

$$E_{\xi,s} = \sqrt{\xi^2 + \bar{\mu}^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2 \pm \xi \sqrt{(E_b - E_a)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2}} \quad (133)$$

Ao diagonalizar a parte cinética da Hamiltoniana com relação as bandas de dispersão  $a$  e  $b$  encontramos uma energia de quase partícula dada por

$$E_{\xi,s} = \xi \pm \sqrt{\left( \frac{E_b - E_a}{2} \right)^2 + |V_{\mathbf{k}}|^2} \quad (134)$$

### - Hibridização não nula e parâmetros de ordem iguais

Para as condições em que  $\Delta_a = \Delta_b = \Delta$

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2(2\Delta^2 + \varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ (\varepsilon_a^2 - \varepsilon_b^2)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \left[ (\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 + \Delta^2 \right] - 4\Delta^2 [V_{\mathbf{k}}^2 + V_{\mathbf{k}}^{\dagger 2}] \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (135)$$

$$E_{\xi,s} = \left\{ \Delta^2 + (\xi^2 + \bar{\mu}^2) + |V_{\mathbf{k}}|^2 \pm \left[ \xi^2 \left( (E_b - E_a)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \right) - \Delta^2 [V_{\mathbf{k}}^2 + V_{\mathbf{k}}^{\dagger 2} - |V_{\mathbf{k}}|^2] \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (136)$$

$$E_{\xi,s} = \sqrt{\Delta^2 + (\xi^2 + \bar{\mu}^2) + |V_{\mathbf{k}}|^2 \pm \sqrt{\xi^2 ((E_b - E_a)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2) - 2\Delta^2 \text{Im}(V_{\mathbf{k}}^2)}} \quad (137)$$

### 4.3 Temperatura Crítica

Tomaremos o caso no qual as duas bandas hibridizadas tem a mesma magnitude para o parâmetro de ordem, assim

$$\Omega = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \left[ \varepsilon_+(\mathbf{k}) - E_{\mathbf{k},s} - \frac{2}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k},s}}) \right] - \frac{\Delta^2}{g} \quad (138)$$

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},s=1,2} \frac{1}{E_{\mathbf{k},s}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},s}}{2}\right) \quad (139)$$

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{E_{\mathbf{k},1}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},1}}{2}\right) + \frac{1}{E_{\mathbf{k},2}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k},2}}{2}\right) \right] \quad (140)$$

Para resolver essa equação analiticamente iremos considerar o caso onde  $\epsilon_a \approx \epsilon_b$ , com isso obtemos uma energia de quase partícula para o da diagonalização da Hamiltoniana cinética onde consideramos a hibridização  $V_{\mathbf{k}} = V$  como uma constante

$$E_{\xi,1} = \xi - V \quad (141)$$

$$E_{\xi,2} = \xi + V$$

Fazendo uma rotação nos eixos de momento pela energia, temos

$$\frac{1}{\lambda} \approx \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\tanh\left(\frac{\xi-V}{2T_c}\right)}{\xi-V} + \frac{\tanh\left(\frac{\xi+V}{2T_c}\right)}{\xi+V} \right] \quad (142)$$

Ao fazer uma mudança de variáveis como feito na teoria BCS

$$\frac{1}{\lambda} \approx \frac{1}{2} \int_{\frac{-V}{2T_c}}^{\frac{\omega-V}{2T_c}} dx_- \frac{\tanh(x_-)}{x_-} + \frac{1}{2} \int_{\frac{V}{2T_c}}^{\frac{\omega+V}{2T_c}} dx_+ \frac{\tanh(x_+)}{x_+} \quad (143)$$

Ao resolver a integral, como feito no apêndice, a temperatura crítica é dada por

$$T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \sqrt{\omega^2 - V^2} e^{-1/\lambda} \quad (144)$$

Esse resultado só é válido para o caso de  $\epsilon_- \approx 0$  e  $V < \omega$ . Com isso, essa equação revela a existência de uma hibridização crítica  $V_c = \omega$  capaz de interromper a supercondutividade. Quando temos uma hibridização simétrica entre as bandas de condução da ordem da energia dos fônons responsáveis pela formação do emparelhamento dos elétrons a supercondutividade é totalmente destruída, como esperado.

#### 4.4 Hibridização Simétrica

Tomaremos o caso geral para hibridização simétrica  $V_{\mathbf{k}} = \gamma k^2$ , na qual  $\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  e o termo  $\gamma$  representa a força da hibridização, e nesse caso será considerada real, sendo a hibridização simétrica  $V(k) = V(-k)$ . Assim podemos substituir o valor de  $k$  em relação a sua dispersão ficando com

$$V_{\xi} = \alpha(\xi + \bar{\mu}) \quad (145)$$

na qual  $\alpha = 2m\gamma$ . Tomando a energia de quase partícula expressa na equação (115) podemos simplifica-la tomando como base o valor real que a hibridização simétrica assume nesse caso

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2 \left( |\Delta_a|^2 + |\Delta_b|^2 + \epsilon_a^2 + \epsilon_b^2 \right) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ \left( |\Delta_a|^2 - |\Delta_b|^2 + \epsilon_a^2 - \epsilon_b^2 \right)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \left[ (\epsilon_a + \epsilon_b)^2 + (\Delta_a - \Delta_b)^2 \right] \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (146)$$

Afim de facilitar nosso cálculo, definiremos

$$\begin{aligned} \Gamma &= |\Delta_a|^2 + |\Delta_b|^2 + \epsilon_a^2 + \epsilon_b^2 \\ \Lambda &= |\Delta_a|^2 - |\Delta_b|^2 + \epsilon_a^2 - \epsilon_b^2 \\ \Sigma &= (\epsilon_a + \epsilon_b)^2 + (\Delta_a - \Delta_b)^2 \end{aligned} \quad (147)$$

de forma que a energia de quase partícula fica dada por

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \sqrt{2\Gamma + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2\Sigma}} \quad (148)$$

Para encontrarmos as equações de Gap como mostrado nas equações 128 e 129 faremos as derivadas da energia de quase partícula como respeito ao seus parâmetros de ordem

$$\frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} = \frac{1}{8E_{\mathbf{k},s}} \left\{ 2 \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_a} \pm \frac{2\Lambda \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_a} + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta_a}}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2\Sigma}} \right\}$$

$$\frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} = \frac{1}{8E_{\mathbf{k},s}} \left\{ 2 \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_b} \pm \frac{2\Lambda \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_b} + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta_b}}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right\} \quad (149)$$

Segue abaixo as derivadas referente a nossa simplificação

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_a} &= 2\Delta_a & \Leftrightarrow & \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_b} = 2\Delta_b \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_a} &= 2\Delta_a & \Leftrightarrow & \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_b} = -2\Delta_b \\ \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta_a} &= 2(\Delta_a - \Delta_b) & \Leftrightarrow & \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta_b} = -2(\Delta_a - \Delta_b) \end{aligned} \quad (150)$$

Nos dando a derivada da energia de quase partícula como

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} &= \frac{1}{2E_{\mathbf{k},s}} \left\{ \Delta_a \pm \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right\} \\ \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} &= \frac{1}{2E_{\mathbf{k},s}} \left\{ \Delta_b \mp \frac{\Lambda \Delta_b + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right\} \end{aligned} \quad (151)$$

Assim nossas equações de Gap pode ser expressa como

$$\frac{\Delta_a}{\lambda_a} = \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{1}{2E_{\mathbf{k},1}} \left( \Delta_a + \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right) + \frac{1}{2E_{\mathbf{k},2}} \left( \Delta_a - \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right) \right] \quad (152)$$

$$\frac{\Delta_b}{\lambda_b} = \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{1}{2E_{\mathbf{k},1}} \left( \Delta_b - \frac{\Lambda \Delta_b + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right) + \frac{1}{2E_{\mathbf{k},2}} \left( \Delta_b + \frac{\Lambda \Delta_b + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \right) \right] \quad (153)$$

Simplificando mais uma vez nossa expressão, chamaremos os termos

$$\begin{aligned} f_a &= \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \\ f_b &= \frac{\Lambda \Delta_b + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Sigma}} \end{aligned} \quad (154)$$

assim

$$\frac{\Delta_a}{\lambda_a} = \frac{1}{4} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\Delta_a}{E_{\mathbf{k},1}} + \frac{\Delta_a}{E_{\mathbf{k},2}} + f_a \left( \frac{1}{E_{\mathbf{k},1}} - \frac{1}{E_{\mathbf{k},2}} \right) \right] \quad (155)$$

$$\frac{\Delta_b}{\lambda_b} = \frac{1}{4} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\Delta_b}{E_{\mathbf{k},1}} + \frac{\Delta_b}{E_{\mathbf{k},2}} - f_b \left( \frac{1}{E_{\mathbf{k},1}} - \frac{1}{E_{\mathbf{k},2}} \right) \right] \quad (156)$$

Como fizemos uma rotação no eixo do momento afim de integrar em função da energia de dispersão como mostrado pela relação  $\xi = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \bar{\mu}$  precisamos substituir na expressão os termos que estão em função de  $\mathbf{k}$  por  $\xi$  como já expressos na equação (116)

$$\frac{\Delta_a}{\lambda_a} = \frac{1}{4} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\Delta_a}{E_{\xi,1}} + \frac{\Delta_a}{E_{\xi,2}} + f_a \left( \frac{1}{E_{\xi,1}} - \frac{1}{E_{\xi,2}} \right) \right] \quad (157)$$

$$\frac{\Delta_b}{\lambda_b} = \frac{1}{4} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\Delta_b}{E_{\xi,1}} + \frac{\Delta_b}{E_{\xi,2}} - f_b \left( \frac{1}{E_{\xi,1}} - \frac{1}{E_{\xi,2}} \right) \right] \quad (158)$$

Podemos reescrever nossas expressões na forma

$$E_{\xi,s} = \frac{1}{2} \sqrt{2\Gamma + 4\alpha^2(\xi + \bar{\mu})^2 \pm 2\sqrt{\Lambda^2 + 4\alpha^2(\xi + \bar{\mu})^2\Sigma}}, \quad (159)$$

$$f_a = \frac{\Lambda\Delta_a + 2\alpha^2(\xi + \bar{\mu})^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4\alpha^2(\xi + \bar{\mu})^2\Sigma}} \quad (160)$$

$$f_b = \frac{\Lambda\Delta_b + 2\alpha^2(\xi + \bar{\mu})^2(\Delta_a - \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4\alpha^2(\xi + \bar{\mu})^2\Sigma}}$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Delta_a^2 + \Delta_b^2 + 2(\xi^2 - \bar{\mu}^2) + \mu_a^2 + \mu_b^2 \\ \Lambda &= \Delta_a^2 - \Delta_b^2 + 4\xi\delta\bar{\mu} \\ \Sigma &= (\Delta_a - \Delta_b)^2 + 4\xi^2 \end{aligned} \quad (161)$$

Resolveremos essa equação de Gap auto-consistentemente de forma acoplada, mas antes disso faremos uma mudança de variável afim de normalizá-la em função do potencial químico  $\bar{\mu}$ , que tem sua relação direta com a média dos valores da dispersão das bandas  $a$  e  $b$  para a superfície de Fermi, substituindo  $\frac{\xi}{\bar{\mu}}$  por  $x$  transformando-a em uma equação adimensional, assim  $x = \frac{\xi}{\bar{\mu}}$ . Usaremos a notação para o parâmetro de ordem  $\frac{\Delta_a}{\bar{\mu}} = \Delta_{\eta x}$ , assim

$$\frac{\Delta_{ax}}{\lambda_a} = \frac{1}{4} \int_0^{\frac{\omega}{\bar{\mu}}} dx \left[ \frac{\Delta_{ax}}{E_{x,1}} + \frac{\Delta_{ax}}{E_{x,2}} + f_{ax} \left( \frac{1}{E_{x,1}} - \frac{1}{E_{x,2}} \right) \right] \quad (162)$$

$$\frac{\Delta_{bx}}{\lambda_b} = \frac{1}{4} \int_0^{\frac{\omega}{\bar{\mu}}} dx \left[ \frac{\Delta_{bx}}{E_{x,1}} + \frac{\Delta_{bx}}{E_{x,2}} - f_{bx} \left( \frac{1}{E_{x,1}} - \frac{1}{E_{x,2}} \right) \right] \quad (163)$$

no qual

$$E_{x,s} = \frac{1}{2} \sqrt{2\Gamma_x + 4\alpha^2(x+1)^2 \pm 2\sqrt{\Lambda_x^2 + 4\alpha^2(x+1)^2\Sigma_x}}, \quad (164)$$

$$f_{ax} = \frac{\Lambda_x \Delta_{ax} + 2\alpha^2(x+1)^2(\Delta_{ax} - \Delta_{bx})}{\sqrt{\Lambda_x^2 + 4\alpha^2(x+1)^2\Sigma_x}} \quad (165)$$

$$f_{bx} = \frac{\Lambda_x \Delta_{bx} + 2\alpha^2(x+1)^2(\Delta_{ax} - \Delta_{bx})}{\sqrt{\Lambda_x^2 + 4\alpha^2(x+1)^2\Sigma_x}}$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma_x &= \Delta_{ax}^2 + \Delta_{bx}^2 + 2(x^2 - 1) + \frac{\mu_a^2 + \mu_b^2}{\bar{\mu}^2} \\ \Lambda_x &= \Delta_{ax}^2 - \Delta_{bx}^2 + 4x \frac{\delta\bar{\mu}}{\bar{\mu}} \\ \Sigma_x &= (\Delta_{ax} - \Delta_{bx})^2 + 4x^2 \end{aligned} \quad (166)$$

Pode-se notar que as equações de Gap são simétricas para uma transformação, simultânea, dos parâmetros de ordem levando  $\Delta_a \rightarrow -\Delta_a$  e respectivamente  $\Delta_b \rightarrow -\Delta_b$ . Para o caso que  $\Delta_{ax} \approx \Delta_{bx}$  podemos simplificar a expressão para

$$\frac{\Delta_x}{\lambda} = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\omega}{\bar{\mu}}} dx \left[ \frac{\Delta_x}{E_{x,1}} + \frac{\Delta_x}{E_{x,2}} \right] \quad (167)$$

Pode-se notar também que para uma solução trivial na qual  $\Delta_a = 0$  para primeira equação de Gap e  $\Delta_b = 0$  para e segunda essas equações dão respectivamente

$$0 = \frac{1}{4} \int_0^{\frac{\omega}{\bar{\mu}}} dx \frac{-2\alpha^2(x+1)^2\Delta_{bx}}{\sqrt{(-\Delta_{bx}^2 + 4x \frac{\delta\bar{\mu}}{\bar{\mu}})^2 + 4\alpha^2(x+1)^2(\Delta_{bx}^2 + 4x^2)}} \left( \frac{1}{E_{x,1}(\Delta_a = 0)} - \frac{1}{E_{x,2}(\Delta_a = 0)} \right) \quad (168)$$

e

$$0 = \frac{1}{4} \int_0^{\frac{\omega}{\bar{\mu}}} dx \frac{-2\alpha^2(x+1)^2\Delta_{ax}}{\sqrt{(\Delta_{ax}^2 + 4x \frac{\delta\bar{\mu}}{\bar{\mu}})^2 + 4\alpha^2(x+1)^2(\Delta_{ax}^2 + 4x^2)}} \left( \frac{1}{E_{x,1}(\Delta_b = 0)} - \frac{1}{E_{x,2}(\Delta_b = 0)} \right) \quad (169)$$

desde que a hibridização seja diferente de zero e a energia de quase partícula, para os parâmetros de ordem nulos, sejam  $E_{x,s} = x \pm \sqrt{\left(\frac{E_b - E_a}{2\bar{\mu}}\right)^2 + |V_x|^2}$ . Observaremos tal comportamento na análise da evolução numérica da equação de Gap como função da hibridização que será realizada na seção de calculo numérico.

## 4.5 Hibridização Antissimétrica

Para tomarmos a Hibridização anti-simétrica, precisamos arrumar alguns termos da Hamiltoniana proposta na equação (102) da forma

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_a(\mathbf{k}) & -V_{\mathbf{k}}^* & \Delta_a^* & 0 \\ -V_{\mathbf{k}} & \varepsilon_b(\mathbf{k}) & 0 & \Delta_b^* \\ \Delta_a & 0 & -\varepsilon_a(\mathbf{k}) & -V_{\mathbf{k}} \\ 0 & \Delta_b & -V_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_b(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (170)$$

nos dando novas configurações nos termos de hibridização dos autos valores de energia

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2 (|\Delta_a|^2 + |\Delta_b|^2 + \varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ (|\Delta_a|^2 - |\Delta_b|^2 + \varepsilon_a^2 - \varepsilon_b^2)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 [(\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 + \Delta_a^2 + \Delta_b^2] + 4\Delta_a\Delta_b[V_{\mathbf{k}}^2 + V_{\mathbf{k}}^{\dagger 2}] \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (171)$$

Da mesma forma as duas outras energias das quase-partículas são  $E_{\mathbf{k},1} = -E_{\mathbf{k},3}$  e  $E_{\mathbf{k},2} = -E_{\mathbf{k},4}$ . A hibridização para o caso antissimétrico é dado por uma função complexa pura na forma  $V_{\mathbf{k}} = i\gamma\mathbf{k}$ , o que nos permite reescrever a equação de quase partícula na forma

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \left\{ 2 (|\Delta_a|^2 + |\Delta_b|^2 + \varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2) + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2 \left[ (|\Delta_a|^2 - |\Delta_b|^2 + \varepsilon_a^2 - \varepsilon_b^2)^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 [(\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 + (\Delta_a + \Delta_b)^2] \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (172)$$

Simplificando nossa equação

$$E_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{2} \sqrt{2\Gamma + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \pm 2\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2\Xi}} \quad (173)$$

na qual a única diferença no caso anterior é dado pela expressão  $\Xi = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)^2 + (\Delta_a + \Delta_b)^2$ . Mais uma vez para encontrarmos as equações de Gap precisamos tomar a derivada da energia de quase partícula em função de seu parâmetro de ordem

$$\frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} = \frac{1}{8E_{\mathbf{k},s}} \left\{ 2 \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_a} \pm \frac{2\Lambda \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_a} + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\partial \Xi}{\partial \Delta_a}}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2\Xi}} \right\}$$

$$\frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} = \frac{1}{8E_{\mathbf{k},s}} \left\{ 2 \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_b} \pm \frac{2\Lambda \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_b} + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\partial \Xi}{\partial \Delta_b}}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right\} \quad (174)$$

Seguem abaixo as derivadas referentes a nossa simplificação

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_a} &= 2\Delta_a & \Leftrightarrow & \frac{\partial \Gamma}{\partial \Delta_b} = 2\Delta_b \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_a} &= 2\Delta_a & \Leftrightarrow & \frac{\partial \Lambda}{\partial \Delta_b} = -2\Delta_b \\ \frac{\partial \Xi}{\partial \Delta_a} &= 2(\Delta_a + \Delta_b) & \Leftrightarrow & \frac{\partial \Xi}{\partial \Delta_b} = 2(\Delta_a + \Delta_b) \end{aligned} \quad (175)$$

Nos dando a derivada da energia de quase partícula como

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_a} &= \frac{1}{2E_{\mathbf{k},s}} \left( \Delta_a \pm \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right) \\ \frac{\partial E_{\mathbf{k},s}}{\partial \Delta_b} &= \frac{1}{2E_{\mathbf{k},s}} \left( \Delta_b \pm \frac{-\Lambda \Delta_b + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right) \end{aligned} \quad (176)$$

Nossa equação de Gap para o parâmetro de hibridização antissimétrico pode ser expressa como

$$\frac{\Delta_a}{\lambda_a} = \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{1}{2E_{\mathbf{k},1}} \left( \Delta_a + \frac{2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b) + \Lambda \Delta_a}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right) + \frac{1}{2E_{\mathbf{k},2}} \left( \Delta_a - \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right) \right] \quad (177)$$

$$\frac{\Delta_b}{\lambda_b} = \frac{1}{2} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{1}{2E_{\mathbf{k},1}} \left( \Delta_b + \frac{2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b) - \Lambda \Delta_b}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right) + \frac{1}{2E_{\mathbf{k},2}} \left( \Delta_b - \frac{2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b) - \Lambda \Delta_b}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \right) \right] \quad (178)$$

Simplificando mais uma vez nossa expressão, chamaremos os termos

$$\begin{aligned} j_a &= \frac{\Lambda \Delta_a + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \\ j_b &= \frac{-\Lambda \Delta_b + 2|V_{\mathbf{k}}|^2(\Delta_a + \Delta_b)}{\sqrt{\Lambda^2 + 4|V_{\mathbf{k}}|^2 \Xi}} \end{aligned} \quad (179)$$

assim

$$\frac{\Delta_a}{\lambda_a} = \frac{1}{4} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\Delta_a}{E_{\mathbf{k},1}} + \frac{\Delta_a}{E_{\mathbf{k},2}} + j_a \left( \frac{1}{E_{\mathbf{k},1}} - \frac{1}{E_{\mathbf{k},2}} \right) \right] \quad (180)$$

$$\frac{\Delta_b}{\lambda_b} = \frac{1}{4} \int_0^\omega d\xi \left[ \frac{\Delta_b}{E_{\mathbf{k},1}} + \frac{\Delta_b}{E_{\mathbf{k},2}} + j_b \left( \frac{1}{E_{\mathbf{k},1}} - \frac{1}{E_{\mathbf{k},2}} \right) \right] \quad (181)$$

Para prosseguir com a equação de Gap precisamos fazer as mesmas substituições feitas para o caso simétrico levando do espaço dos momentos para o da energia de dispersão e em seguida normalizando a equação em função da média do potencial químico  $\bar{\mu}$ . Outro fator importante é quanto a hibridização antissimétrica que foi tomada anteriormente nesta mesma seção como um imaginário puro  $V_{\mathbf{k}} = i\gamma\mathbf{k}$ . Tomando o quadrado da hibridização temos que  $|V_{\mathbf{k}}|^2 = \gamma^2\mathbf{k}^2 \rightarrow 2m\gamma^2(\xi + \bar{\mu})$ . Desde que  $[\gamma] = [k/m]$ , podemos dizer que  $[\gamma] = [k_F/m]$ , com isso  $\gamma^2 = k_F^2/m^2$  ou  $m\gamma^2 = k_F^2/m = 2E_F$ . Podemos definir o parâmetro da hibridização de forma adimensional para antissimetria  $\alpha = 2m\gamma^2/\bar{\mu}$ , de tal modo que  $|V_{\mathbf{k}}|^2 = \alpha(\xi + \bar{\mu})$ . Assim como fizemos para o caso da hibridização simétrica, a equação de Gap em termos da variável  $x$  pode ser escrita como

$$\frac{\Delta_{ax}}{\lambda_a} = \frac{1}{4} \int_0^\omega dx \left[ \frac{\Delta_{ax}}{E_{x,1}} + \frac{\Delta_{ax}}{E_{x,2}} + j_{ax} \left( \frac{1}{E_{x,1}} - \frac{1}{E_{x,2}} \right) \right] \quad (182)$$

$$\frac{\Delta_{bx}}{\lambda_b} = \frac{1}{4} \int_0^\omega dx \left[ \frac{\Delta_{bx}}{E_{x,1}} + \frac{\Delta_{bx}}{E_{x,2}} + j_{bx} \left( \frac{1}{E_{x,1}} - \frac{1}{E_{x,2}} \right) \right] \quad (183)$$

no qual

$$E_{x,s} = \frac{1}{2} \sqrt{2\Gamma_x + 4|V_x|^2 \pm 2\sqrt{\Lambda_x^2 + 4|V_x|^2\Xi_x}}, \quad (184)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_x &= \Delta_{ax}^2 + \Delta_{bx}^2 + 2(x^2 - 1) + \frac{\mu_a^2 + \mu_b^2}{\bar{\mu}^2} \\ \Lambda_x &= \Delta_{ax}^2 - \Delta_{bx}^2 + 4x \frac{\delta\bar{\mu}}{\bar{\mu}} \\ \Xi_x &= (\Delta_{ax} + \Delta_{bx})^2 + 4x^2 \end{aligned} \quad (185)$$

e

$$\begin{aligned} j_a &= \frac{\Lambda_x \Delta_{ax} + 2|V_x|^2(\Delta_{ax} + \Delta_{bx})}{\sqrt{\Lambda_x^2 + 4|V_x|^2\Xi_x}} \\ j_b &= \frac{-\Lambda_x \Delta_{bx} + 2|V_x|^2(\Delta_{ax} + \Delta_{bx})}{\sqrt{\Lambda_x^2 + 4|V_x|^2\Xi_x}} \end{aligned} \quad (186)$$

Como fizemos no caso simétrico é possível obter uma nova equação de Gap para o caso  $\Delta_{ax} \approx \Delta_{bx}$

$$\frac{\Delta_x}{\lambda} = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\omega}{\bar{\mu}}} dx \left[ \frac{\Delta_x}{E_{x,1}} + \frac{\Delta_x}{E_{x,2}} + \frac{4|V_x|^2(\Delta_x)}{\sqrt{\Lambda_x^2 + 4|V_x|^2\Xi_x}} \left( \frac{1}{E_{x,1}} - \frac{1}{E_{x,2}} \right) \right] \quad (187)$$

## 4.6 Cálculo Numérico

Os cálculos numéricos realizados para teoria BCS, supercondutividade em uma banda, foram de suma importância para o desenvolvimento deste trabalho, porém, para calcular as equações de Gap em uma teoria multibanda exigem um aprofundamento mais detalhado das ferramentas utilizadas. As energias de quase partículas no nosso modelo não são integradas facilmente, pois precisamos resolver equações auto consistentemente, o que significa que elas devem ser integradas acopladamente.. Para resolver o problema da integral usamos um método de integração usando a expansão dos polinômios de Jacobe e Legeandre na forma

Tabela 2: Primeiro passo: resolver a integral pelo método de Jacobe e Legeandre

---

```

n := 50 :
zero1 := fsolve(P(n, x)):
for ix form 1 to n do
x1[ix]:=zero1[ix]:
w1[ix]:=abs(subs(x = x1[ix]2/((1 - x2) * (diff(P(n, x), x)2))))):
end do:

```

---

Agora precisamos criar dois procedimentos distintos, um para equação de Gap referentes a  $\Delta_a$  e um para  $\Delta_b$ . Temos então

Tabela 3: segundo passo: declara a equação de Gap por um procedimento interagindo como o método de resolução da integral

---

```

 $\Delta_{af}$  := proc(  $\Delta_a$ ,  $\Delta_b$ ,  $\alpha$ , a1, a2)
Variáveis locais ...; Variáveis globais ...;
Declaração de parâmetros numéricos;
IQ := 0;
for ix from 1 to n do
x:=0.5 * ((a2 - a1) * x1[ix] + a1 + a2):
Integrando:= Recebe Função de Gap;
IQ:=evalf(IQ + (W1[ix] * (0.5) * (a2 - a1)*Integrando ) );
end do:
evalf(IQ):
end proc:

```

---

A dificuldade de resolução da integral foi resolvida, agora precisamos definir qual comando resolverá nossa equação autoconsistente. Para o caso da teoria BCS o método *fsolve* foi de grande ajuda em princípio, porém exigia demais da máquina. Ao usar o comando *with(CodeTools)* e *usage* podemos ter os dados [*memory used*, *CPUTime*, *RealTime*, *GC-Time*] de processamento da resolução numérica. Ao usar a função *fsolve* para função de Gap vs Temperatura, para apenas um ponto, tivemos os valores de processamento na ordem de: *memory used*=117.81MiB, *cpu time*=2.31s, *real time*=2.31s, *gc time*=156.25ms. Para achar o valor de mesmo ponto usando uma rotina de resolução por interação temos os dados na ordem de: *memory used*=8.60MiB, *cpu time*=94.00ms, *real time*=102.00ms, *gc time*=0ns.

A eficiência da rotina é vinte e duas vezes mais rápida que a função dada pelo programa e a memória gasta é treze vezes menor. Como precisamos de muitos pontos para obter uma análise satisfatória do comportamento do Gap supercondutor fica inviável usar um comando próprio da ferramenta utilizada (maple) para desenvolvimento dos cálculos, assim resolvemos nosso problema com um procedimento de solução por interação de forma acoplada.

Tabela 4: terceiro passo: solução por interação de forma acoplada

---

```

 $\Delta_{solve} := \text{proc}(\Delta_{ac}, \Delta_{bc}, \alpha, a1, a2, \text{toler})$ 
local ...:, global ...;
j:=0:
 $\Delta_a := \Delta_{ac} : \Delta_b := \Delta_{bc} :$ 
for i from 0 by 1 while j = 0 do;
  ffa :=  $\Delta_{af}(\Delta_a, \Delta_b, \alpha, a1, a2)$ ;
  ffb :=  $\Delta_{bf}(\Delta_a, \Delta_b, \alpha, a1, a2)$ ;
  if (abs( $\Delta_a - ffa$ )<=toler) and (abs( $\Delta_b - ffb$ )<=toler) then
     $\Delta_{af} := \Delta_a :$ 
     $\Delta_{bf} := \Delta_b :$ 
    j:=j+1:
  end if:
   $\Delta_a := ffa : \Delta_b := ffb :$ 
  if (i>200) then
    j:=j+1:
  end if:
end do:
print( $\alpha, \Delta_a, \Delta_b$ );
end proc:

```

---

Nosso interesse é entender o comportamento dos nossos parâmetros de ordem ( $\Delta_a$ ,  $\Delta_b$ ) em função da força da hibridização  $\alpha = 2m\gamma$ . Já somos capazes de tirar resultados a partir desse momento, mas para entender o comportamento dos parâmetros em função da hibridização faz-se necessário salvar os valores dos parâmetros de ordem dentro de um espectro da hibridização. Usaremos a função  *fopen*  seguido de um  *for*  para plotagem dos gráficos, na forma

Tabela 5: quarto passo: criando um documento com todos os pontos dados

---

```

Arquivos:=proc()
local  $\alpha$ , Tentativa;
fileGapVsHibr:=fopen( sprintf("fileGapVsHibr1"), 'WRITE');
for  $\alpha$  from 0 by 0.1 to 3 do
 $\Delta_{solve}(\Delta_{ac}, \Delta_{bc}, \alpha, a1, a2, toler)$ ;
fprintf(fileGapVsHibr, "%6f t%6f n",  $\alpha$ ,  $\Delta_{solve}(\Delta_{ac}, \Delta_{bc}, \alpha, a1, a2, toler)$ );
print( $\alpha$  ,  $\Delta_{solve}(\Delta_{ac}, \Delta_{bc}, \alpha, a1, a2, toler)$ );
end do;
close(fileGapVsHibr);
end proc:

```

---

Com esse procedimento criamos um documento que pode ser lido com o bloco de notas, mas para o maple entender é necessário mais uma abordagem. Podemos usar a função  *readlib*  para ler o arquivo na forma

Tabela 6: quarto passo: lendo o arquivo criado e convertendo-o em uma forma matricial para ser plotado

---

```

readlib(readdata): with(plots):
datalist1 := readdata('fileGapVsTemp1',2):
convert(datalist1,matrix):
plot(datalist1)

```

---

Essa rotina é a mais abrangente devido a equação de Gap acoplada, porém, é possível modificá-la com facilidade a fim de resolver modificações da equação de Gap. A primeira modificação foi feita para resolver a condição que o valor do parâmetro  $\Delta_a \approx \Delta_b$ , no caso simétrico e antisimétrico, expresso na equação (167) e (187), nos dando o comportamento do parâmetro de ordem como segue abaixo

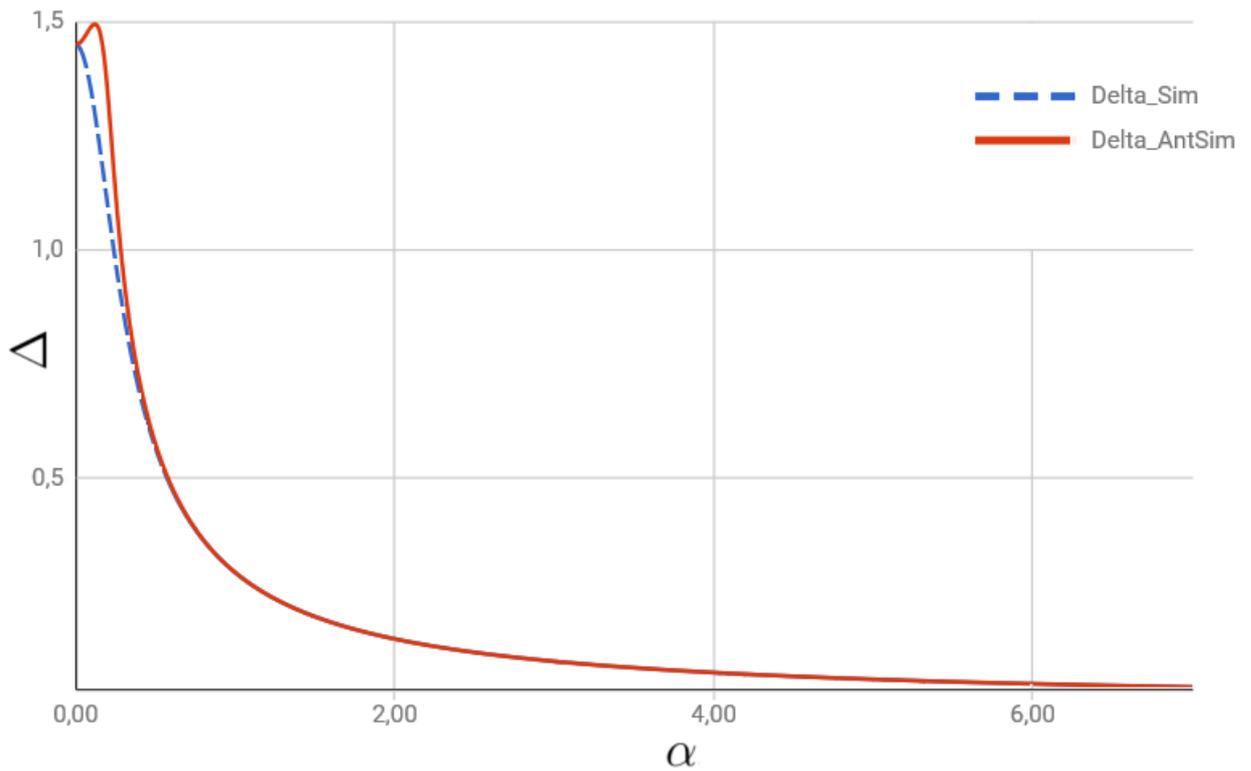


Figura 13: Comportamento do parâmetro de ordem  $\Delta$  em função da força da hibridização  $\alpha$

Para as equações de Gap acopladas temos

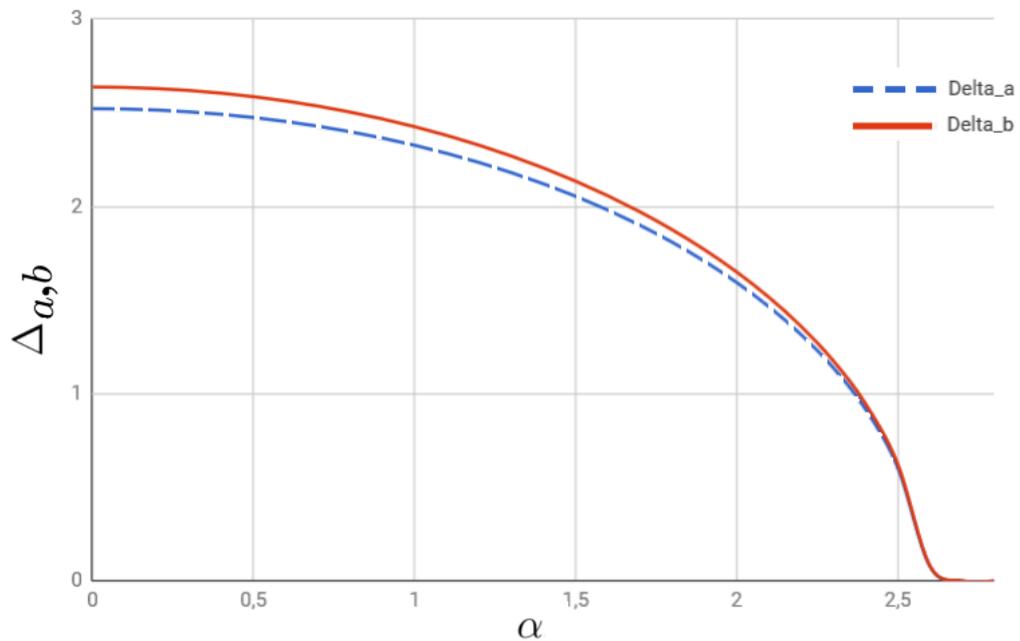


Figura 14: Comportamento dos parâmetros de ordem  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$  em função da hibridização  $\alpha$  para o caso de Hibridização  $V_k$  simétrico

Podemos observar que não há um aumento da supercondutividade para o caso simétrico. A supercondutividade então é destruída conforme a força da hibridização entre as bandas  $a$  e  $b$  aumentam.

Para os casos onde os parâmetros de ordem são aproximadamente iguais, observamos que o comportamento da supercondutividade é explicitamente diferente do caso onde temos as duas equações acopladas, sendo assim, não é interessante obter materiais que tenham essa característica já que a supercondutividade é eliminada mais facilmente. Podemos então mostrar o comportamento dos parâmetros de ordem no caso da hibridização antissimétrica

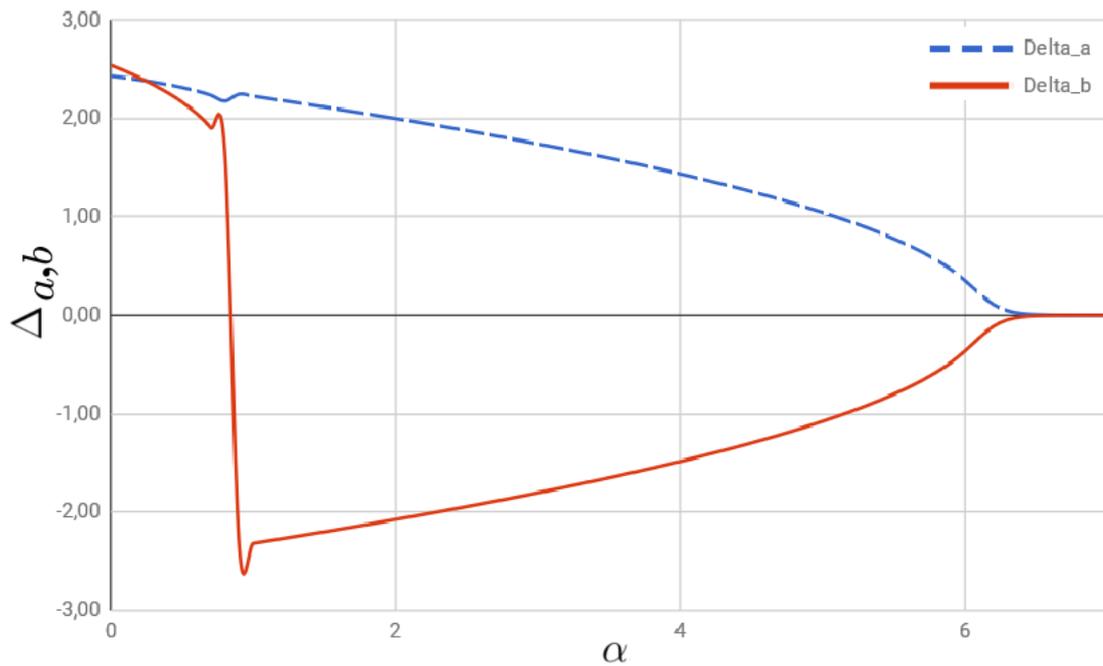


Figura 15: Comportamento dos parâmetros de ordem  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$  em função da força da Hibridização

Com os parâmetros de ordem  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$  definidos podemos voltar a expressão (110) e (111) e entender o que acontece com o Gap induzido do nosso modelo como exposto no gráfico da figura 16.

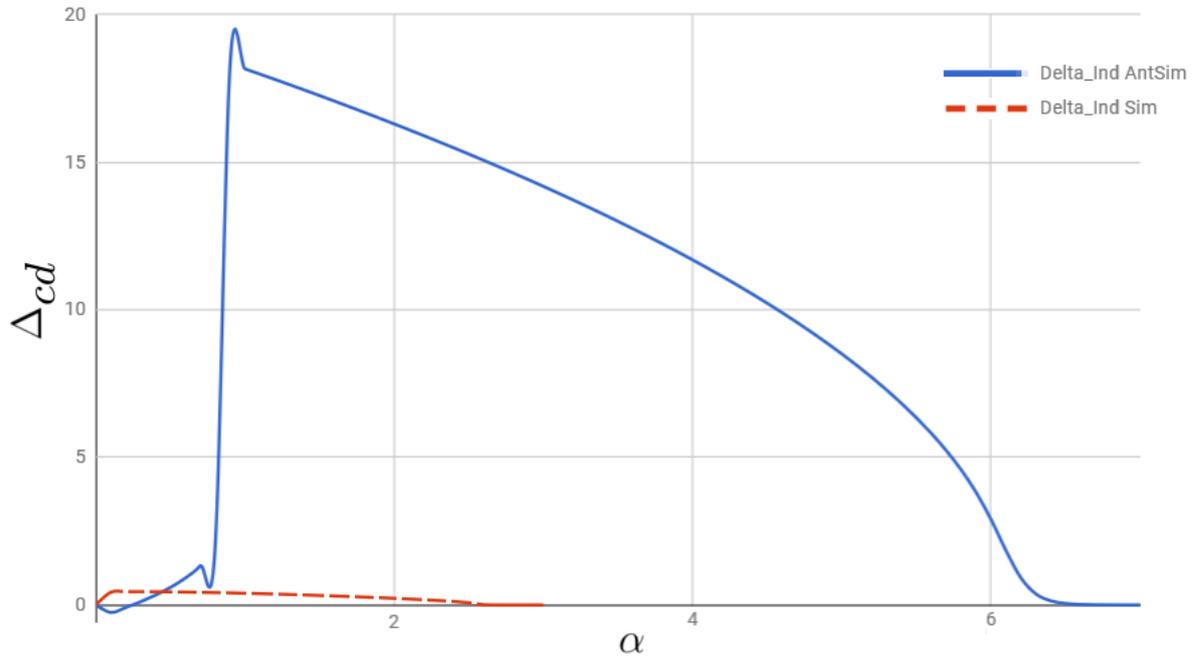


Figura 16: Comportamento dos parâmetros de ordem induzidos em função da força da Hibridização

A hibridização simétrica não contribui para a formação de um parâmetro de ordem induzido, já para a hibridização antisimétrica em um certo limite há o aparecimento do Gap induzido obtendo um máximo e em seguida ele decai conforme a força da hibridização cresce.

## 5 Conclusão

Ao generalizar a hamiltoniana para o caso de duas interações intra-banda, fomos capazes de investigar as propriedades de supercondutores de duas bandas hibridizadas. Consideramos que essas bandas são formadas por orbitais eletrônicos com momento angular, na qual se hibridizam de forma simétrica ou antissimétrica. Ao levar em conta as interações atrativas intra-banda (banda  $s$ ), responsável pelo emparelhamento dos gaps  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$ , vimos o surgimento de uma indução inter-banda do sistema, gerando uma interação inter-banda para o orbital  $p$ . Fomos capazes de encontrar duas equações de Gap distintas, porém, acopladas. Para resolução das equações de Gap, foram feitas rotinas em Maple que resolveram as equações auto-consistentemente de forma acoplada.

O estudo da Teoria BCS e suas ramificações, assim como toda a supercondutividade, nos possibilitou visualizar um novo problema que não só responde ao comportamento de uma liga metálica, como é o caso do  $MgB_2$ , mas ao mesmo tempo, a revisão bibliográfica realizada deu suportes para o entendimento do comportamento físico em sistemas mais complexos e de como se obter resoluções numéricas, como é o caso da equação (99) possibilitando um aprendizado na resolução de problemas numéricos auto-consistentes, assim como a ampliação da resolução para sistemas acoplados.

Pudemos observar que uma hibridização simétrica tal que  $V(-k) = V(k)$  leva a um gap de emparelhamento inter-banda simétrico induzido  $\Delta_{cd}$ . Como esperado, um  $V$  simétrico é prejudicial para a supercondutividade, levando ao desaparecimento da supercondutividade em ambos os casos, inter e intra-banda, à medida que a força da hibridização aumenta e atinge um valor crítico  $\alpha_c$ . O intervalo induzido para esta hibridização simétrica é pequeno, uma vez que os Gaps se aproximam um do outro à medida que a hibridização é aumentada e desaparece em  $\alpha_c$ . Vale a pena lembrar aqui que os intervalos de pares induzidos para hibridização simétrica e anti-simétrica dependem da diferença  $\Delta_b - \Delta_a$ .

O cenário é quantitativamente e qualitativamente alterado na presença de uma hibridização anti-simétrica satisfazendo  $V(k) = -V(-k)$ , que é responsável pelo surgimento de um Gap de emparelhamento inter-banda de onda- $p$  induzida  $\Delta_{cd}$  para um sistema de duas bandas. Neste caso, os Gaps entre as bandas intra-bandas  $\Delta_a$  e  $\Delta_b$  permanecem relativamente distantes um do outro, comportando-se quase como parábolas refletidas. Os dois Gaps acabarão por desaparecer à medida que a força da hibridização antissimétrica é aumentada até um valor crítico, que é da ordem da energia  $\omega_c$ .

Mostramos também que as ordenações supercondutoras inter-banda são induzidas na total

ausência de interação supercondutora entre as duas bandas, o que é, então, completamente dependente da hibridização entre elas. Este fato faz com que a hibridização em um sistema de duas bandas seja um ingrediente fundamental na obtenção de emparelhamento da onda- $p$  do spin-triplete. Com os parâmetros de ordem definidos em temperatura nula  $\Delta_{a,b}(0)$  e o valor da temperatura crítica obtido os próximos passos para uma compreensão maior do sistema de onda  $s$  intra banda será encontrar parâmetros de ordem em função da temperatura  $\Delta_{a,b}(T)$ .

## 6 Apêndice

### 6.1 Valor esperado

Para visualizarmos melhor nossa equação, iremos trabalhar primeiramente apenas com os termos em  $\mathbf{l}$ .

$$\mathbf{L} = (|u_1|^2 + u_1^* \nu_1 c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* + \nu_1^* u_1 c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow} + |\nu_1|^2 c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^*)$$

Com as regras de comutação expressas nas equações (refeq4, refeq5) podemos fazer uma modificação na última expressão de modo a ficar

$$c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* = -c_{1\uparrow} c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* = c_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow} c_{-1\downarrow}^*$$

$$\mathbf{L} = (|u_1|^2 + u_1^* \nu_1 c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* + \nu_1^* u_1 c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow} + |\nu_1|^2 c_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow} c_{-1\downarrow}^*)$$

Mais uma vez usaremos as regras de comutação

$$\mathbf{L} = (|u_1|^2 + u_1^* \nu_1 c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* + \nu_1^* u_1 c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow} + |\nu_1|^2 (1 - c_{1\uparrow}^* c_{1\uparrow})(1 - c_{-1\downarrow}^* c_{-1\downarrow}))$$

$$\mathbf{L} = (|u_1|^2 + u_1^* \nu_1 c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* + \nu_1^* u_1 c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow} + |\nu_1|^2 (1 - c_{-1\downarrow}^* c_{-1\downarrow} c_{1\uparrow}^* c_{1\uparrow} + c_{1\uparrow}^* c_{1\uparrow} c_{-1\downarrow}^* c_{-1\downarrow}))$$

Sabemos que ao aplicar um operador destruição em um estado vazio o resultaddo é zero ( $c_{\mathbf{k}\sigma} |\phi_0\rangle = 0$ ), com isso temos:

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{\mathbf{l} \neq \mathbf{k}} \langle \phi_0 | (u_{\mathbf{k}}^* + \nu_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} (u_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}) (|u_1|^2 + u_1^* \nu_1 c_{1\uparrow}^* c_{-1\downarrow}^* + |\nu_1|^2) |\phi_0 \rangle$$

Agora faremos a parte em  $\mathbf{k}$

$$\mathbf{K} = (u_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + \nu_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}) (u_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow})$$

$$\mathbf{K} = (|u_{\mathbf{k}}|^2 c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow})$$

com as regras de comutação podemos chegar no termo

$$\mathbf{K} = (|u_{\mathbf{k}}|^2 c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* + \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^*)$$

Conforme aplicarmos o Bra da esquerda para direita, encontraremos zero nos casos ( $\langle \phi | c_{\mathbf{k}\sigma}^* = 0$ ), ou seja, o primeiro termo e o segundo já será igual a zero. Agora precisamos modificar a terceira e a quarta parte da expressão de  $\mathbf{K}$

$$\mathbf{K} = (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}) c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}) (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}) (1 - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}))$$

$$\mathbf{K} = (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}) (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}) (1 - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}))$$

Voltando em  $N$

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{l \neq \mathbf{k}} \langle \phi_0 | (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2) (|u_l|^2 + u_l^* \nu_l c_{l\uparrow}^* c_{-l\downarrow}^* + |\nu_l|^2) | \phi_0 \rangle$$

Já tinhamoms visto a relação de  $|u_l|^2 + |\nu_l|^2 = 1$

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{l \neq \mathbf{k}} \langle \phi_0 | (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2) (1 + u_l^* \nu_l c_{l\uparrow}^* c_{-l\downarrow}^*) | \phi_0 \rangle$$

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{l \neq \mathbf{k}} \langle \phi_0 | (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}|^2 c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{l\uparrow}^* c_{-l\downarrow}^* + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 u_l^* \nu_l c_{l\uparrow}^* c_{-l\downarrow}^*) | \phi_0 \rangle$$

Podemos reescrever o termo do meio como

$$|\nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}|^2 c_{l\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-l\downarrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}$$

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{l \neq \mathbf{k}} \langle \phi_0 | (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}|^2 c_{l\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-l\downarrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 u_l^* \nu_l c_{l\uparrow}^* c_{-l\downarrow}^*) | \phi_0 \rangle$$

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{l \neq \mathbf{k}} \langle \phi_0 | (\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}|^2 c_{l\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-l\downarrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 u_l^* \nu_l c_{l\uparrow}^* c_{-l\downarrow}^*) | \phi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned} \bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \prod_{\mathbf{l} \neq \mathbf{k}} & \left( \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} \langle \phi_0 | c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} | \phi_0 \rangle + |\nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}|^2 \langle \phi_0 | c_{\mathbf{l}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{l}\downarrow}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} | \phi_0 \rangle \right. \\ & \left. + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle + |\nu_{\mathbf{k}}|^2 u_{\mathbf{l}}^* \nu_{\mathbf{l}} \langle \phi_0 | c_{\mathbf{l}\uparrow}^* c_{-\mathbf{l}\downarrow}^* | \phi_0 \rangle \right) \end{aligned}$$

Provamos então que

$$\bar{N} = 2 \sum_{\mathbf{k}} |\nu_{\mathbf{k}}|^2$$

## 6.2 Integral

faremos a seguinte mudança de variável: Imagine um triângulo retângulo com um ângulo  $\alpha$ , seu cateto adjacente igual a  $\Delta$  e seu cateto oposto igual a  $\xi_{\mathbf{k}}$ . Logo a hipotenusa será dada por  $h = (\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}$ . Com isso  $\xi_{\mathbf{k}} = \Delta \tan(\alpha)$  e  $d\xi_{\mathbf{k}} = \Delta \sec(\alpha)^2 d\alpha$ . Agora substituindo na equação (178)

$$\begin{aligned} \frac{2}{V\rho(0)} &= \int \frac{1}{(\Delta^2 + \Delta^2 \tan(\alpha)^2)^{1/2}} \Delta \sec(\alpha)^2 d\alpha = \int \frac{1}{\Delta (1 + \tan(\alpha)^2)^{1/2}} \Delta \sec(\alpha)^2 d\alpha \\ \frac{2}{V\rho(0)} &= \int \frac{\sec(\alpha)^2}{(1 + \tan(\alpha)^2)^{1/2}} d\alpha = \int \frac{\sec(\alpha)^2}{(\sec(\alpha)^2)^{1/2}} d\alpha = \int_{\arctan(-\frac{\hbar\omega_c}{\Delta})}^{\arctan(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta})} \sec(\alpha) d\alpha \end{aligned}$$

A função secante é uma função par, então pela simetria do problema podemos

$$\frac{2}{V\rho(0)} = 2 \int_0^{\arctan(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta})} \sec(\alpha) d\alpha$$

Agora usaremos o seguinte método para resolver essa integral: Multiplicaremos ela por  $\frac{u}{u}$ , onde  $u = \sec \alpha + \tan \alpha$  e  $du = (\sec \alpha \tan \alpha + \sec^2 \alpha) d\alpha$

$$\frac{2}{V\rho(0)} = 2 \int_0^{\arctan(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta})} \frac{\sec^2 \alpha + \sec \alpha \tan \alpha}{u} d\alpha = 2 \int \frac{\sec^2 \alpha + \sec \alpha \tan \alpha}{u(\sec^2 \alpha + \sec \alpha \tan \alpha)} du$$

$$\frac{1}{V\rho(0)} = \int_1^{\sec[\arctan(\hbar\omega_c/\Delta)] + \tan[\arctan(\hbar\omega_c/\Delta)]} \frac{du}{u}$$

$$\frac{1}{V\rho(0)} = \ln \{ \sec[\arctan(\hbar\omega_c/\Delta)] + \tan[\arctan(\hbar\omega_c/\Delta)] \} = \ln \left\{ \sec[\arctan(\hbar\omega_c/\Delta)] + \frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \right\}$$

$$\frac{1}{V\rho(0)} = \ln \left\{ \sqrt{1 + (\hbar\omega_c/\Delta)^2} + \frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \right\}$$

$$e^{\frac{1}{V\rho(0)}} = \sqrt{1 + (\hbar\omega_c/\Delta)^2} + \frac{\hbar\omega_c}{\Delta}$$

Se  $\hbar\omega_c \geq 3\Delta$  podemos fazer uma aproximação da forma como segue abaixo. Essa aproximação se explica quando se olha o gráfico da função arcotangente de uma secante que se parece com  $f(x) = x$  quando  $x \geq 3$ .

$$e^{\frac{1}{V\rho(0)}} = 2\frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \Rightarrow \Delta \cong 2\hbar\omega_c e^{-\frac{1}{V\rho(0)}}$$

Outra forma de justificar essa aproximação é que no acoplamento fraco  $\rho(0)V \ll 1$ , e na literatura[7]  $\rho(0)V \leq 0,3$  com a igualdade aproximada para uma margem de um por cento.

### 6.3 Bogoliubov

Vamos trabalhar primeiramente a Hamiltoniana livre ( $\mathcal{H}_l$ )

$$\mathcal{H}_l = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} [(u_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}0}^* + \nu_{\mathbf{k}}^*\gamma_{\mathbf{k}1})(u_{\mathbf{k}}^*\gamma_{\mathbf{k}0} + \nu_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}1}^*) + (-\nu_{\mathbf{k}}^*\gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}1}^*)(-\nu_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}0}^* + u_{\mathbf{k}}^*\gamma_{\mathbf{k}1})]$$

$$\mathcal{H}_l = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[ u_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + \nu_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^* \right. \\ \left. + \nu_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}0} \gamma_{\mathbf{k}0}^* - \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} \gamma_{\mathbf{k}1} - u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}0}^* + u_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \right]$$

$$\mathcal{H}_l = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[ u_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1} + \nu_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \nu_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}0} \gamma_{\mathbf{k}0}^* \right. \\ \left. + u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* - u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}0}^* + \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} - \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} \gamma_{\mathbf{k}1} \right]$$

$$\mathcal{H}_l = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[ u_{\mathbf{k}}^2 (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + \nu_{\mathbf{k}}^2 (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}0} \gamma_{\mathbf{k}0}^*) \right. \\ \left. + u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* - \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}0}^*) + \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} - \gamma_{\mathbf{k}0} \gamma_{\mathbf{k}1}) \right]$$

Agora devemos lembrar as relação de anticomutação do operadores fermiônicos dado por  $\{c_{\mathbf{k}\sigma}^*, c_{\mathbf{k}\sigma'}^*\} = \{c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma'}\} = 0$  e  $\{c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma'}^*\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}$ , com essa relação podemos mostrar que a relação dado por (78) só é verdade se respeitar o as mesmas relações de anticomutação do operador criação e aniquilação, dando então

$$\{\gamma_{\mathbf{k}\sigma}^*, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^*\} = \{\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = 0$$

$$\{\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^*\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\mathcal{H}_l = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[ u_{\mathbf{k}}^2 (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) - \nu_{\mathbf{k}}^2 (\gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1} + \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} - 2) + 2u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*) + 2\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) \right]$$

$$\mathcal{H}_l = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \left[ (u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2\nu_{\mathbf{k}}^2 + 2u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*) + 2\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) \right]$$

Precisamos realizar o mesmo procedimento para a parte de interação ( $\mathcal{H}_i$ )

$$\mathcal{H}_i = - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*)$$

$$\mathcal{H}_i = - \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* + \nu_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*) (-\nu_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^*) + \Delta_{\mathbf{k}}^* (-\nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* + u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^*) - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*]$$

$$\mathcal{H}_i = - \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* - \nu_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} - u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^*) +$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* (u_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} - \nu_{\mathbf{k}}^2 \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* - \nu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^*) - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*]$$

$$\mathcal{H}_i = - \sum_{\mathbf{k}} [u_{\mathbf{k}}^2 (\Delta_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \Delta_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) - \nu_{\mathbf{k}}^2 (\Delta_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + \Delta_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*) +$$

$$\nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^* - \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0}) + u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^* - \gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0}) - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*]$$

$$\mathcal{H}_i = \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_{\mathbf{k}} (\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) + (\Delta_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} - \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^*) + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*]$$

Agora reescrevendo toda nossa Hamiltoniana dada por  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \mathcal{H}_i$

$$\sum_{\mathbf{k}} [\epsilon_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2\epsilon_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^2 + 2\epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*) + 2\epsilon_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* (\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0})$$

$$+ \Delta_{\mathbf{k}} (\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) + (\Delta_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} - \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^*) + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*]$$

Já tínhamos feito as considerações de  $\Delta_{\mathbf{k}}$ ,  $\nu_{\mathbf{k}}$  e  $u_{\mathbf{k}}$  serem valores pertencentes aos conjunto dos

reais, com isso

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} [\epsilon_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2)(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2\epsilon_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}^2 + 2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) \\ & + \Delta_{\mathbf{k}}(\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2)(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}) + 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1} - 1) + \Delta_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}}^*] \\ \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}} [(\epsilon_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}})(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) \\ & + 2\epsilon_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}(b_{\mathbf{k}}^* - 2\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}) + (2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}(\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2))(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0})] \end{aligned}$$

Podemos ver pela equação (50) que  $\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}} = b_{\mathbf{k}}$  e com  $V_{\mathbf{k}1} = -V$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}} [(\epsilon_{\mathbf{k}}[(u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2)(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2\nu_{\mathbf{k}}^2] \\ & + 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + (2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}(\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2))(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^* + \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0})] - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{V} \end{aligned}$$

Para que a transformação de Bogoliubov-Valatin seja útil, ou seja, diagonalize nossa Hamiltoniana precisamos que os termos cruzados  $(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}1}^*)$  desapareçam, com isso podemos escolher os parâmetros dado por  $\nu_{\mathbf{k}}$  e  $u_{\mathbf{k}}$  que façam isso acontecer, logo

$$2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}(\nu_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) = 0$$

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (\epsilon_{\mathbf{k}}[(u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2)(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2\nu_{\mathbf{k}}^2] + 2\Delta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\gamma_{\mathbf{k}0}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^* \gamma_{\mathbf{k}1})) \right\} - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{V}$$

## 6.4 Integral de $T_c$

$$\frac{1}{V\rho(0)} = \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \tanh\left(\frac{|\xi_{\mathbf{k}}|}{2k_b T_c}\right) = \int_0^{\frac{\hbar\omega_c}{2k_b T_c}} \frac{\tanh(x)}{x} dx$$

faremos agora uma integração por partes  $\int u dv = uv - \int v du$ , onde  $u = \tanh(x)$  e  $dv = \frac{1}{x}$

$$\int_0^{\frac{\hbar\omega_c}{2k_b T_c}} \frac{\tanh(x)}{x} dx = \tanh\left(\frac{\hbar\omega_c}{2k_b T_c}\right) \ln\left(\frac{\hbar\omega_c}{2k_b T_c}\right) - \int_0^{\frac{\hbar\omega_c}{2k_b T_c}} dx \ln x \operatorname{sech}^2 x$$

Agora faremos uma substituição da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial n} x^{n-1} = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial n} x^n = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial n} e^{\ln(x^n)} = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial n} e^{n \ln(x)} = \frac{1}{x} \ln(x) e^{n \ln(x)} = \frac{1}{x} \ln(x) x^n = \ln(x) x^{n-1}$$

Para  $n = 1$  temos

$$\frac{\partial}{\partial n} x^{n-1} = \ln(x)$$

Voltando a equação referente a integração da tangente hiperbólica, temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{V\rho(0)} &= \tanh \frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c} \ln \frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c} - \left[ \frac{\partial}{\partial n} \int_0^{\frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c}} dx x^{n-1} \operatorname{sech}^2 x \right]_{n=1} \\ \frac{1}{V\rho(0)} &= \tanh \frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c} \ln \frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c} + \left[ \ln \left( \frac{4e^\gamma}{\pi} \right) \right] \\ e^{\frac{1}{V\rho(0)}} &= \left( \frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c} \right)^{\tanh \frac{\hbar\omega_c}{2k_bT_c}} \frac{4e^\gamma}{\pi} \end{aligned}$$

Se  $\hbar\omega_c$  for pelo menos duas vezes maior que  $2k_bT_c$  podemos aproximar essa expressão para

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{V\rho(0)}} &= \frac{\hbar\omega_c}{k_bT_c} \frac{2e^\gamma}{\pi} \\ k_bT_c &= \frac{2e^\gamma}{\pi} \hbar\omega_c e^{-\frac{1}{V\rho(0)}} = 1.13 \hbar\omega_c e^{-\frac{1}{V\rho(0)}} \end{aligned}$$

Podemos agora comparar a nossa primeira equação de gap dada para  $\Delta(T = 0)$

$$\frac{\Delta(0)}{k_bT_c} = \frac{2\hbar\omega_c e^{-\frac{1}{V\rho(0)}}}{1.13\hbar\omega_c e^{-\frac{1}{V\rho(0)}}} = 1,764$$

$$\Delta(0) = 1,764 k_bT_c$$

Com isso podemos observar que o Gap de energia em  $T = 0$  é comparável com a energia  $k_bT_c$ . O fator numérico 1,76 é comprovado experimentalmente de formas bastantes diversificadas em diversos materiais e em diferentes direções de  $\mathbf{k}$ , onde o alcance experimental varre  $3,0k_bT_c$  a  $4,5k_bT_c$  ([7]) para o valor experimental de  $2\Delta$  e o valor da teoria BCS é dado por  $3,5k_bT_c$  como mostrado na equação (112).

## Referências

- [1] Thomas Kuhn.: A estrutura das Revolução Científicas
- [2] Blundell, Stephen.: Superconductivity: A Very Short Introduction, Oxford University, 2009.
- [3] Antonio S. T. Pires.: Evoluções das ideias da Física, L and F Editorial, 2009.
- [4] Osada, Jun'ichi.: Evoluções das idéias da Física, Edgard Blücher, Ed. da Universidade de São Paulo, 1972.
- [5] "The Nobel Prize in Physics 1913", Nobelprize.org, acessada em maio 2017.
- [6] H. K Onnes, Communic. Phys. LAb. Univ. Leiden. **122B**, (1911).
- [7] Tinkham, Michael: Introduction to Superconductivity, McGraw Hill, 2<sup>a</sup>ed.,1996.
- [8] J. B. Ketterson and S. N. Song: Superconductivity, Cambridge University press., 1999.
- [9] Kristian Fossheim and Asle Sudbo: Superconductivity: Physics and Applications, John Wiley and Sons Ltd., 2004.
- [10] W. Meissner and R. Ochenfeld, Naturwissenschaften. **21**, 787 (1933)
- [11] David J. Griffiths: Eletrodinâmica, 3<sup>a</sup>ed, Pearson and ABDR., 2004.
- [12] Gorter, C, J.; Casimir, H, B, G: On Supraconductivity I. Physics **1** (1-6)(1934).
- [13] F. London and H. London: Proc. R. Soc. Lond. A. **149**, 71 (1935).
- [14] T. E. Faber and A. B. Pippard, Proc. Roy. Soc. (London) **A231**, 336 (1955).
- [15] Emanuel Maxwell:Isotope effect in the Superconducting of Mercury, Phys. Rev **78**, 477 (1950).
- [16] Jules de Launay: The Isotope effect in Superconductivity, Phys. Rev **93**, 661 (1954).
- [17] H. Frohlich: Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature, Phys. Rev **79**, 845 (1950).
- [18] J. Barden: Theory of the Superconducting State, Phys. Rev **79**, 167 (1950).
- [19] C. A. Reynolds, B. Serin, L. B. Nesbitt:The Isotope Effectory in Superconductivity. I. Mercury, Phys. Rev **84**, 691 (1951).

- [20] Sbrushnikov, L. V., *et al.*, Zh Eksp. Teor. Fiz **7** 221 (1937)
- [21] A. Abrikosov, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. **32**, 1442 (1957)[Sov. Phys.JETP **5**, 1174 (1957)].
- [22] "The Nobel Prize in Physics 2003", Nobelprize.org, acessada em maio 2017.
- [23] A. A. Abrikosov Nobel, Lecture: Type-II superconductors and the vortex lattice, Reviews of Modern Physics, VolumeE 76, July 2004.
- [24] L. N. Cooper: Bound Electron Fermi in a Degenerate Fermi Gas, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [25] J. Bardeen , L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **106**, 162(1957).
- [26] N. N. Bogoliubov: A New Method in the Theory of superconductivity. Nuovo Cimento **7**, **794** (1958).
- [27] J. G. Valatin, Nuovo Cimento **7**, **843** (1958).
- [28] H. Suhl, B. T. Matthias e L. R. Walker Phys. Rev. Lett. **3**, **552** (1959).
- [29] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu, Nature London **410**,41 (2001).
- [30] J. Akimitsu, *Symposium on transition Metal Oxides*. Semdai, Japan 2001.
- [31] Paul C. Canfield and Sergey L. Bud'Ko.: Low-Temperature Superconductivity is Warming Up - Scientific American **81** (2005)
- [32] Y. Wang, T. Plackowski, A. Junod, Physica C **355**, 179 (2001).
- [33] F. Bouquet *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 047001-1Ð047001-4 (2001).
- [34] H. D. Yang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 167003- 1Ð167003-4 (2001).
- [35] P. Szabo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 137005-1Ð137005-4 (2001).
- [36] F. Giubileo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 177008-1Ð177008-4 (2001).
- [37] X. K. Chen *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 157002-1Ð157002-4 (2001).
- [38] S. Tsuda *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 177006-1Ð177006-4 (2001).

- [39] H. J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature London* **418**, 758 (2002).
- [40] C. Petrovic et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, L337 (2001).
- [41] S. M. Ramos et al., *Physica B: Cond. Matt.* **359**, 398 (2005).
- [42] M. Nunez-Regueiro, D. C. Freitas, R. Brusettiand, J. Marcus, *Sol. Sta. Comm.* **159**, 26 (2013).
- [43] M. Daniel et al., *Phys. Rev. Lett* **95**, 016406 (2005).
- [44] E. D. Bauer et al., *Phys. Rev. B* **73**, 245109 (2006).
- [45] S. M. Ramos et al., *Phys. Rev. Lett.* **105**, 126401 (2010).
- [46] E. D. Bauer et al., *Physica B* **359**, 35 (2005).
- [47] E. D. Bauer et al., *Phys. Rev. B* **73**, 245109 (2006).
- [48] I. T. Padilha and M. A. Continentino, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 3466 (2009).
- [49] M. A. Continentino, I. T. Padilha and H. Caldas, *J. Stat. Mech.*, doi:10.1088/1742-5468/2014/07/P07015, 126401 (2010).
- [50] M. A. Continentino, F. Deus, I. T. Padilha and H. Caldas, *Ann. Phys.* **348**, 1 (2014).
- [51] A. Kitaev, *Phys. Usp.* **44**, 131 (2001).
- [52] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003).
- [53] T. D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, Y. Nakamura, C. Monroe, J. L. O. Brien, *Nature* **64**, 45 (2010).
- [54] J.-Petri Martikainen, J. Larson, *Phys. Rev. A* **86**, 023611 (2012).
- [55] S. Yin, J. E. Baarsma, M. O. J. Heikkinen, J.-P. Martikainen, and P. T?orma, arXiv:1508.05321.
- [56] G. M. Japiassu, M. A. Continentino, and A. Troper, *Phys. Rev. B* **45**, 2986 (1992).
- [57] A. Moreo, M. Daghofer, J. A. Riera, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **79**, 134502 (2009).

- 
- [58] Heron Caldas, F. S. Batista, Mucio A. Continentino, Fernanda Deus, David Nozadze, A Two-band Model for p-wave Superconductivity, *Annals of Physics* v. 384, p. 211-224, (2017).
- [59] A. M. Black-Schaffer<sup>1</sup> and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. B* **88**, 104514 (2013).
- [60] F. Deus, M. A. Continentino, H. Caldas, *Ann. Phys.* **362**, 215 (2015).
- [61] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 040502 (2010).
- [62] J. Alicea, *Phys. Rev. B* **81**, 125318 (2010).